



Simulation aux Grandes Échelles de l'Atomisation, Application à l'Injection Automobile.

Jeremy Chesnel

► To cite this version:

Jeremy Chesnel. Simulation aux Grandes Échelles de l'Atomisation, Application à l'Injection Automobile.. Modélisation et simulation. Université de Rouen, 2010. Français. NNT: . tel-00604870

HAL Id: tel-00604870

<https://theses.hal.science/tel-00604870>

Submitted on 29 Jun 2011

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.

THÈSE

présentée

À L'UNIVERSITÉ DE ROUEN

En vue de l'obtention du grade de :

Docteur de l'Université de Rouen

Discipline : Physique
Spécialité : Mécanique des fluides

par

Jérémy Chesnel

Simulation aux Grandes Échelles de l'Atomisation, Application à l'Injection Automobile.

soutenue le 10 juin 2010

Composition du jury :

Rapporteurs

Jean-Paul Caltagirone
Bénédicte Cuenot

Professeur des Universités, TREFLE - Bordeaux.
Docteur, CERFACS - Toulouse.

Examineurs

Dominique Legendre
Alain Berlemont

Professeur des Universités, IMF - Toulouse.
Directeur de recherche, CORIA - Rouen.

Membre invité

Mai Funk

Docteur, Renault S.A. - Guyancourt.

Directeurs de thèse

Julien Réveillon
François-Xavier Demoulin

Professeur des Universités, CORIA - Rouen.
Maître de conférence, CORIA - Rouen.

Extrait d'une discussion entre thésards :

- Pourquoi écrire des remerciements ?
- Remercier qui ?
- Eh bien, tout ceux qui ont participé, d'une manière ou d'une autre, de près ou de loin à l'élaboration de notre travail.
- Ah ouais, mais j'ai pas d'idées moi...
- Mmh, cela pourrait donner quelque chose comme :

La thèse n'est pas un travail que l'on mène seul, bien qu'il n'apparaisse qu'un nom unique et triomphant sur la page de garde. C'est pour cela qu'il existe une section tout spécialement consacrée à citer les personnes qui ont participé, d'une manière ou d'une autre, de près ou de loin à l'élaboration de mon travail : les bien nommés « remerciements ».

De fait, si le manuscrit n'a vu aucun autre auteur que moi durant la traversé du désert qu'a représenté la rédaction, l'amont et l'aval de ce travail, synthétisés ici, ont vu de nombreux acteurs.

Par chronologie inverse :

Tout d'abord, je tiens à remercier Bénédicte Cuenot et Jean Paul Caltagirone qui ont bien voulu être rapporteurs de mon travail puis membres du jury. Je tiens également à remercier Dominique Legendre et Alain Berlemont qui ont bien voulu être membres du jury.

Alain d'ailleurs, un merci particulier pour m'avoir annoncé à peu près une semaine avant que je te donne le manuscrit, je cite : « la LES d'atomisation, j'y crois pas du tout ». Espérons que je t'ai quelque peu fait changer d'avis.

Je tiens à remercier Renault, S.A. et tout particulièrement Frédéric Ravet et Maï Funk, également membre du jury. Merci de m'avoir accordé votre confiance dès le début de la thèse. Mais surtout, je souligne là la belle attitude scientifique de la part d'un industriel qui, tout au long de ces trois ans, a su me laisser (nous laisser...) les mains libres et explorer des chemins qui n'ont pas forcément un intérêt immédiat.

En remontant encore le temps, on tombe (aille !) sur Julien Réveillon et François-Xavier Demoulin, mes deux directeurs de thèse. Pas de jaloux, un paragraphe chacun :

Merci Julien donc, car tu es le premier à m'avoir fais confiance pour un travail « houleux » si j'ose dire (le sloshing en VOF ça date ! !). J'ai apprécié et apprécie toujours ta rigueur, aussi bien scientifique que dans les rapports humains. (Merci aussi d'avoir fais travailler ma femme...)

Merci F.-X., surtout pour tes idées scientifiques (les modèles n'ont qu'à bien se tenir) et les nombreuses discussions que nous avons eu, même si j'avoue que ton imagination, apparemment sans fin, m'a souvent fais repartir de ton bureau avec plus de questions qu'en y rentrant !

Question boulot, je tiens à remercier particulièrement Thibaut Ménard et Mathieu Doring sans qui mon travail n'aurait pas été aussi abouti. Thibo, tout simplement pour ton code AR-CHER version VOF/Level-set mais également pour tes noms de variables super compréhensibles (kkk me semble être un bon exemple, iii aussi...). Mathieu, merci pour le support et le formalisme mathématique d'une part, et les méthodes numériques d'autre part. Puisses-tu rejoindre l'Amérique du sud dans les meilleures conditions.

Ensuite, merci aux amis et collègues sans qui le café n'aurait pas tout à fais eu le même

goût ! À commencer par mes 2 compères de Master II.

Guillaume Boutin, jamais à cours d'idée quand il s'agit de faire du « do it yourself ». Par exemple : régler un laser au millimètre avec un transpalette, grande expérience.

François Troadec pour les longues discussions qui consistent à refaire le monde sans jamais rien faire. C'est enrichissant, surtout avec un bon vin (ou une bière, c'est selon...).

Enfin, pêle-mêle : Nico, tu t'es mis en ami sur Deezer, snif merci. Merci Émeline, dont le volume sonore de la voix, bien que non destiné aux pieds, nous les casses parfois (je blagues MeuhMeuh). Arrivé bon dernier pendant la rédaction, merci tout de même à Yann qui m'aura appris ce qu'est une vraie « vie de garçon » célibataire. Merci également à Mathieu pour les discussions qui nous mutuellement remontées le moral pendant la rédaction. Merci également à mon stagiaire, Ben, pour... Ah, oui ! pour t'être bien débrouillé tout seul. Merci, J.B. et Christophe pour ces petites sessions musicales qui furent souvent un bol d'air. Certains sont certainement absents, je ne manquerai pas de me rattraper de vive voix.

Enfin, merci à ma famille toute entière de m'avoir soutenu durant ces longues années d'études. Et ce, à la fois financièrement mais également moralement. Merci, à mes parents de ne pas avoir cédé à la tentation d'une réorientation sauvage en seconde... Et Angélique, la réponse est oui ! J'ai bien révisé pour ma soutenance.

De façon plus anecdotique, je voudrais également remercier Charlot et Jerry, qui comme tous félins que se respectent, se contrefichent de ma thèse : cela relativise les choses...

L'ultime remerciement ira à Charlotte, ma femme : mon amour et ma vie. Du moins, jusqu'à ce que le (ou la) responsable du flamby effect pointe le bout de son nez... (Il va falloir partager !) Concernant spécifiquement ce travail, il fut heureux que je te rencontre, car sans toi ce travail n'aurait pas été aussi abouti, j'en suis persuadé.

*Dans les moteurs il est heureux que
« l'existence précède l'essence »*

RÉSUMÉ :

Simulation aux grandes échelles de l'atomisation : application à l'injection automobile.

L'injection liquide est un processus important dans beaucoup d'applications industrielles et plus spécifiquement au sein des moteurs à combustion. Beaucoup de méthodes RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*) ont été développées, dans le cas de l'atomisation, aussi bien en utilisant le formalisme Lagrangien que Eulérien. Cependant, les simulations LES (*Large Eddy Simulation*) sont connues pour être plus précises et mieux représenter les phénomènes physiques dans le cas monophasique.

Développer la LES pour le cas diphasique est donc naturellement une étape nécessaire à franchir. Cependant, la simulation de l'atomisation requiert un traitement spécial de l'interface. Deux cas limites sont traités dans la littérature :

- L'interface peut être bien capturée par le maillage. À ces endroits la LES doit rejoindre les résultats de méthodes classiques utilisées en DNS comme les méthodes VOF ou *level-set*. Ceci est une approche nécessaire proche injecteur.
- Le maillage ne permet plus de suivre fidèlement l'interface, lors de la création de plissements inférieurs à la taille d'une maille. Dans ce cas le calcul doit reproduire les résultats d'une LES considérant des structures et des gouttes inférieures à la taille de la maille. Cette approche est nécessaire loin de l'injecteur dans la zone dispersée.

C'est dans ce cadre que le travail réalisé durant cette thèse s'articule : le développement d'un modèle LES d'atomisation capable de passer continuellement d'une méthode à l'autre. La mise en œuvre de ce modèle a permis d'obtenir des résultats dans une configuration proche de l'injection Diesel, qui sont alors comparés à une base de données DNS.

ABSTRACT :

Large Eddy Simulation for atomization : application to automotive engines injection.

Liquid injection takes an important part in many physical processes, especially within internal combustion engine (ICE). Up to know the Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) approach has been widely used, both in Eulerian and Lagrangian framework. Several works on atomization have been done in our team developing the ELSA model. However, LES of atomization seems to be a necessarily step forward. In addition to standard LES method for turbulent flows, a special attention is necessarily to represent the interface. Two limit cases have to be considered :

- The liquid surface can be well captured with the available mesh size (or filter size) then the LES formulation must recover the DNS methods used to track the interface (such as Level Set or VOF)
- The liquid surface wrinkles size are smaller than the mesh size and the two-phase LES formulation must recover the LES used for spray where finally droplets are considered very small by comparison to the mesh size.

In this work we present a LES method for two phase flow that can recover these two limits. It is shown that the unresolved SGS (Sub Grid Scale) term that appears in the phase function equation plays an important role, even if it is very small by comparison to the resolved contribution. Application of this method to the atomization of a Diesel jet is presented. LES results are then compared to a DNS data base.

Table des matières

Table des figures	13
Nomenclature	17
Introduction générale	21
1 Contexte de l'étude et notions fondamentales	27
1.1 Généralités sur l'injection dans les moteurs Diesel	27
1.1.1 Évolution des systèmes d'injection	29
1.1.2 Les injecteurs <i>common rail</i>	31
1.2 Quelques observations expérimentales	32
1.2.1 Un premier exemple	33
1.2.2 Mise en évidence d'un cœur liquide	34
1.3 Description du phénomène physique	37
1.3.1 Nombres adimensionnels	38
1.3.2 Théorie linéaire temporelle appliquée au fractionnement d'un jet liquide	40
1.3.3 Régimes de fractionnement d'un jet liquide	41
1.3.4 Classification des régimes de fractionnement	45
1.3.5 Paramètres influençant l'atomisation primaire	46
1.4 Conclusions sur l'étude expérimentale du phénomène physique	50
2 Revue des modèles d'atomisation	51
2.1 L'approche numérique	51
2.1.1 L'outil numérique pour la simulation d'écoulements fluides	51
2.1.2 Réduction de la complexité	53
2.1.2.1 Le formalisme RANS	53
2.1.2.2 Le formalisme LES	55
2.2 Modèles d'atomisation	56
2.2.1 Simulation numérique directe d'un écoulement liquide/gaz en atomisation	57
2.2.2 Modèle RANS d'atomisation	61
2.2.2.1 Méthode discrète pour un spray	61
2.2.2.2 Corrélation d'Elkottb [29]	63
2.2.2.3 Corrélation d'Hiroyasu-Arai-Tabata [43]	63
2.2.2.4 Le modèle « WAVE »	64
2.2.2.5 Le modèle « ELSA »	67

2.2.3	Simulation aux grandes échelles pour l'atomisation primaire . . .	71
2.3	Bilan et conclusions sur les approches antérieures	75
3	Simulation aux grandes échelles : modélisations et tests de sous maille	79
3.1	Introduction	79
3.1.1	Généralités sur la LES	79
3.1.2	Intérêts de la simulation aux grandes échelles	81
3.2	Opération de filtrage en LES	83
3.2.1	Définition de la convolution en une dimension	83
3.2.2	Propriétés du filtre	84
3.2.3	Filtrage dans l'espace spectral	84
3.2.4	Erreur de commutation	85
3.2.5	Filtrage dans plusieurs dimensions	86
3.2.6	Quelques exemples de filtres	86
3.2.6.1	Le filtre porte	87
3.2.6.2	Le filtre Gaussien	87
3.2.6.3	Le filtre passe bas	87
3.2.7	Aspect numérique du filtrage	88
3.3	Mise en évidence des termes de sous maille	90
3.3.1	Cas monophasique	91
3.3.2	Extension à plusieurs phases	92
3.3.2.1	Equations monofluides pour les interfaces non réactives	92
3.3.2.2	Filtrage des équations monofluides	96
3.3.2.3	Filtrage de Favre	99
3.4	Modélisation de sous maille	100
3.4.1	Modèles monophasiques classiques	101
3.4.1.1	Décompositions de Léonard/Germano	101
3.4.1.2	Modèle visqueux	102
3.4.1.3	Modèle de similarité d'échelles	105
3.4.1.4	Modèle mixte	106
3.5	Analyses <i>a priori</i>	106
3.5.1	Principe des tests <i>a priori</i>	106
3.5.2	Présentation du cas DNS de référence	108
3.5.2.1	Généralités sur le code ARCHER	108
3.5.2.2	Cas physique étudié	111
3.5.2.3	Étude sur les grandeurs turbulentes	113
3.5.2.4	Effet de l'opération de filtrage sur la fonction indicatrice de phase	117
3.5.3	Hierarchisation des termes de sous maille	120
3.5.3.1	Généralités	120
3.5.3.2	Contribution de l'énergie cinétique de sous maille . . .	122
3.5.3.3	Contribution des termes de sous maille de l'équation de bilan de la quantité de mouvement	123
3.5.3.4	Contribution relative du terme de sous maille de l'équation bilan de la fonction de phase	129
3.5.4	Tests des modèles de sous maille	131

3.5.4.1	Notations et expressions des contributions de sous maille et des modèles associés	131
3.5.4.2	Résultats préliminaires pour le modèle de similarité d'échelles & discussion	133
3.5.4.3	Étude complémentaire	134
3.5.4.4	Comparaison des contributions modèles et exactes pour le terme convectif	140
3.5.4.5	Comparaison des contributions modèles et exactes pour le terme temporel	151
3.5.4.6	Comparaison des contributions modèles et exactes pour le terme interfacial	152
3.5.4.7	Conclusions et discussion sur les tests des modèles de sous maille	154
3.6	Conclusions	157
4	Développement d'un modèle d'atomisation pour la LES	161
4.1	Problématiques liquide/gaz pour la LES	161
4.1.1	L'approche LES standard appliquée au cas liquide/gaz	165
4.1.1.1	Description des structures	167
4.1.2	Influence de τ_χ	171
4.1.3	Conclusion sur la méthode LES Eulérienne « standard »	172
4.2	Proposition d'un modèle LES d'atomisation	173
4.2.1	Idée générale du modèle	174
4.2.2	Équations de transport	175
4.2.2.1	Choix des variables à transporter	175
4.2.2.2	Modélisation des termes de sous maille	176
4.2.2.3	Interface résolue	177
4.2.2.4	Description topologique du spray de sous maille	178
4.2.3	Choix d'un solveur numérique	178
4.3	Mise en œuvre du modèle dans ARCHER	179
4.3.1	Passage à la forme « non conservative »	179
4.3.2	Aspects numériques	180
4.3.2.1	Méthode de projection	180
4.3.2.2	Prise en compte des discontinuités à l'interface	182
4.3.2.3	Algorithme de redistance	187
4.3.2.4	Calcul de la courbure	191
4.3.2.5	Profil en sortie de buse et injection de turbulence	191
4.3.3	Conclusions sur les modifications apportées au solveur Navier-Stokes	193
4.4	Equation de transport de la densité d'interface liquide/gaz	194
4.4.1	Définitions et généralités.	195
4.4.2	Origine et construction de l'équation de transport de la densité d'interface liquide/gaz	196
4.4.2.1	Équation de transport de la densité de surface de flamme	197
4.4.2.2	Modèle de Vallet <i>et al</i> [129, 130]	198
4.4.3	Adaptation des modèles existants pour la LES	200

4.4.3.1	Modélisation du terme de glissement, $\bar{\Sigma}(\bar{u}_\alpha - \bar{u}_{\Gamma\alpha})$	204
4.4.3.2	Traitement du terme d'initialisation, $\dot{\bar{\Sigma}}_{mix}$	205
4.4.3.3	Modélisation du terme $\dot{\bar{\Sigma}}_{int}$	207
4.4.4	Etude sur la densité d'interface minimale, $\bar{\Sigma}_{min}$	211
4.4.4.1	Étude simple	212
4.4.4.2	Étude paramétrique sur une sphère	212
4.4.4.3	Estimation de la densité d'interface minimale : Cas test DNS	213
4.5	Conclusions sur le modèle LES d'atomisation	217
5	Résultats du modèle LES d'atomisation	219
5.1	Introduction	219
5.2	Comportement qualitatif du modèle	220
5.2.1	Début d'injection	221
5.2.2	Fraction de volume résolue, $\bar{\Phi}$	223
5.2.3	Densité d'interface, $\bar{\Sigma}$	224
5.2.4	Échelle de longueur $l_{D_{32}}$	228
5.3	Grandeurs moyennes et comparaison avec la DNS	232
5.3.1	Aspect pratique	238
5.3.2	Pénétration et dispersion moyenne de liquide	239
5.3.2.1	Profils moyens et écarts types de fraction de volume résolues	239
5.3.2.2	Angle de Spray et longueur de rupture, L_{BU}	245
5.3.2.3	Profils moyens et écarts types de la vitesse axiale résolue	249
5.3.3	Discussion sur l'aspect numérique	256
5.3.4	Spray de sous maille	267
5.3.4.1	Profils moyens de densité d'interface	268
5.4	Conclusion	276
	Conclusion générale	277
	Appendices	285
	A Schémas WENO pour le transport d'un scalaire	286
	B PDF jointe et moyenne conditionnée	289
	Bibliographie	291

Table des figures

1	Exemple d'application de l'atomisation liquide/gaz dans l'art pariétal . .	21
1.1	Schéma des étapes rencontrées dans un système de combustion depuis l'injection	28
1.2	Représentation schématisée d'un jet liquide haute pression	29
1.3	Les différents types d'injection rencontrées dans les moteurs Diesel . . .	30
1.4	Schéma d'un injecteur <i>common rail</i> et visualisation des buses d'injection	32
1.5	Déstabilisation d'un jet liquide par un écoulement d'air coaxial	33
1.6	Différents processus d'instabilités intervenant sur l'interface liquide/gaz	34
1.7	Atomisation de jets coaxiaux pour différentes vitesses de liquide et de gaz	35
1.8	Comparaison entre l'imagerie balistique et l'ombroscopie pour un jet Diesel haute pression [46]	36
1.9	Résultats de Idlahcen <i>et al</i> [47] obtenus par imagerie balistique.	37
1.10	Schématisation du jet liquide cylindrique utilisé pour l'analyse de stabilité temporel	41
1.11	Diagramme de stabilité d'un jet rond cylindrique obtenu par Leroux <i>et al</i> [73, 74]	42
1.12	Classification des régimes d'atomisation.	45
1.13	Schématisation des processus menant à l'atomisation primaire d'après [5]	46
1.14	Caractérisation expérimentale de l'influence de la turbulence [121] . . .	47
1.15	Influence du rapport L_{inj}/D_0 [31]	48
1.16	Influence du rapport L_{inj}/D_0 sur la longueur de rupture [89]	49
1.17	Visualisation du phénomène de cavitation dans un injecteur transparent [110]	49
2.1	Illustration, sur un maillage cartésien bidimensionnel, des deux méthodes Eulériennes de suivi d'interface	58
2.2	Exemple de simulation DNS de l'atomisation d'un jet, résultats de Ménard <i>et al</i> [90, 91]	60
2.3	Représentation Lagrangienne d'un spray	63
2.4	Instabilité de type Kelvin-Helmholtz pour le modèle « WAVE » [105] . .	64
2.5	Schéma de la désintégration d'une « goutte mère » pendant le temps de rupture τ_{BU} , selon le modèle « WAVE » [105]	66
2.6	Exemples de résultats obtenus en LES d'atomisation primaire pour des jets Diesel, [23, 14]	74
2.7	Interface liquide/gaz obtenue en LES d'atomisation primaire, [39].	75
3.1	Spectre de l'énergie cinétique turbulente.	80

3.2	Schématisation des relations entre les différents formalismes DNS, LES et RANS	82
3.3	Filtrage d'un signal quelconque	83
3.4	Le filtre porte	88
3.5	Le filtre Gaussien	89
3.6	Le filtre passe bas	90
3.7	Domaine monofluide.	93
3.8	Coupure du spectre au niveau « test ».	103
3.9	Schéma de principe des tests <i>a priori</i>	107
3.10	Interface liquide/gaz pour le jet DNS	109
3.11	Images instantanées du jet DNS	110
3.12	Définition des zones d'études	111
3.13	Visualisation de l'interface liquide/gaz du jet DNS	113
3.14	Propriétés turbulentes du jet DNS, moyenne radiale	115
3.15	Correspondance entre l'espace spectral 3D et le spectre 1D	116
3.16	Spectre d'énergie cinétique du jet	117
3.17	Impact de l'opération de filtrage sur un champ de fraction de volume.	118
3.18	Masses volumiques ρ et $\overline{\rho\theta}$	121
3.19	Ratio $\overline{k}/k$ pour 2 positions	123
3.20	Contribution de sous maille, équation des moments	126
3.21	Estimation des contributions de sous maille, terme convectif	127
3.22	Exemple de la réponse impulsionnelle d'une filtre Gaussien	128
3.23	Contributions de sous maille et résolues, équation de l'interface	130
3.24	Contribution de sous maille du terme convectif, coupe xy en zone 1	134
3.25	Contribution de sous maille du terme temporel, coupe xy en zone 1	135
3.26	Contribution de sous maille du terme τ_χ , coupe xy en zone 1	135
3.27	Profils selon x de C_i et C_i^m du terme convectif	136
3.28	Exemples de diagrammes de dispersion	137
3.29	« Poids » théorique des différentes composantes de la contribution de sous maille	138
3.30	Profils des contributions exactes du terme convectif C_i , direction 1	139
3.31	Résultats du modèle de Smagorinsky, terme convectif, C_s constant, $\overline{\Delta} = 5\Delta_x$	143
3.32	Résultats du modèle de Smagorinsky, terme convectif, C_s constant, $\overline{\Delta} = 13\Delta_x$	144
3.33	Résultats du modèle de Smagorinsky, terme convectif, C_s dynamique, $\overline{\Delta} = 5\Delta_x$	145
3.34	Résultats du modèle de Smagorinsky, terme convectif, C_s dynamique, $\overline{\Delta} = 13\Delta_x$	146
3.35	Evolution du coefficient C_s dynamique en fonction de z/D_0	147
3.36	Résultats du modèle de similarité d'échelles, terme convectif, $\overline{\Delta} = 5\Delta_x$	148
3.37	Résultats du modèle de similarité d'échelles, terme convectif, $\overline{\Delta} = 13\Delta_x$	149
3.38	Evolution du coefficient C_c en fonction du rapport $\overline{\Delta}/\Delta_x$	150
3.39	Résultats du modèle de similarité d'échelles, terme temporel, $\overline{\Delta} = 5\Delta_x$	152
3.40	Résultats du modèle de similarité d'échelles, terme temporel, $\overline{\Delta} = 13\Delta_x$	153
3.41	Résultats du modèle de similarité d'échelles, terme interfacial	155

3.42	Comparaison des termes temporel et convectif avec le modèle de similarité d'échelles, symboles : DNS, lignes pleine modélisation.	158
4.1	PDF de tailles de gouttes obtenue dans le cadre DNS [90].	163
4.2	Schématisation des 2 cas limites repérés en LES.	164
4.3	Domaine de calcul	167
4.4	Comparaison du Jet DNS [90] et LES standard	169
4.5	Influence du maillage sur la fraction de volume	170
4.6	Jets obtenu avec le formalisme DNS de suivi d'interface.	171
4.7	Effet de la prise en compte du terme de sous maille τ_χ	173
4.8	Schéma de principe du modèle LES d'atomisation	174
4.9	Interface résolue dans un volume de contrôle	177
4.10	Illustration de la méthode ghost fluid : variable discontinue	182
4.11	Illustration de la méthode ghost fluid : dérivée discontinue	184
4.12	Saut de masse volumique à l'interface, cas DNS et LES.	187
4.13	Application de l'algorithme de réinitialisation	190
4.14	Visualisation 3D de la fonction distance.	190
4.15	Energie cinétique adimensionnée à la sortie de l'injecteur	193
4.16	Comparaison des fractions de volume non filtrée Φ et filtrée $\bar{\Phi}$	194
4.17	Schéma explicatif de la densité d'air interfaciale	195
4.18	Collision binaire gouttes obtenu par Tanguy [125]	202
4.19	Collision binaire de gouttes simulé en DNS [125].	202
4.20	Exemples de production/destruction de la densité d'interface	203
4.21	Fraction de volume d'une goutte en évaporation : résultats DNS [125]	204
4.22	Initialisation de la densité d'interface proche injecteur	206
4.23	Etude sur le Weber critique [82, 83]	210
4.24	Domaine cubique	212
4.25	Cas de la sphère.	213
4.26	Résultats pour le cas de la sphère.	214
4.27	Exemple de triangulation au sein d'une maille	215
4.28	Résultats du test DNS : pdf jointe de Φ et Σ , comparaison avec Σ_{min}^{mod}	216
4.29	Schéma de l'algorithme de résolution du modèle LES	218
5.1	Visualisation de la localisation des profils pour l'étude statistique.	221
5.2	Comparaison des résultats en début d'injection avec différentes méthodes	223
5.3	Évolution temporelle la fraction de volume liquide résolue	225
5.4	Champs instantanés de fraction de volume résolue	226
5.5	Évolution temporelle de la densité d'interface liquide/gaz	229
5.6	Champ et profils du taux d'étirement résolu, influence sur les terme source de la densité d'interface	230
5.7	Comparaison des champs instantanés de $\bar{\Sigma}_{min}$, $\bar{\Sigma}$, et $\bar{\Sigma}_{crit}$	231
5.8	Évolution temporelle de l'échelle de longueur $l_{D_{32}}$	233
5.9	Champs instantanés de l'échelle $l_{D_{32}}$	234
5.10	Champ instantané de $l_{D_{32}}$, isosurface de fraction de volume $\bar{\Phi} = 0.5$	235
5.11	Moyennes et variances résolue obtenues par Veynantes <i>et al</i> [132]	236

5.12	Influence de l'opération de filtrage sur les moyennes et les écarts types de fraction de volume.	237
5.13	Schéma illustrant la méthode utilisée pour les comparaison <i>a posteriori</i> DNS/LES.	238
5.14	Profils de la fraction de volume moyenne, cas $32^2 \times 256$	242
5.15	Profils de la fraction de volume moyenne, cas $64^2 \times 512$	243
5.16	Profils d'écarts types de la fraction de volume, cas $32^2 \times 256$	244
5.17	Profils d'écarts types de la fraction de volume, cas $64^2 \times 512$	245
5.18	Angle de spray et longueur de pénétration du cœur liquide, $64^2 \times 512$. .	247
5.19	Angle de spray et longueur de pénétration du cœur liquide, $32^2 \times 256$. .	248
5.20	Influence de la vitesse d'injection - $64^2 \times 512$	250
5.21	Vitesse axiale moyenne, cas $32^2 \times 256$	251
5.22	Vitesse axiale moyenne, cas $64^2 \times 512$	252
5.23	Profils de variance de la vitesse axiale, cas $32^2 \times 256$	254
5.24	Profils de variance de la vitesse axiale, Cas $64^2 \times 512$	255
5.25	Comparaison de champs instantanés DNS filtrés avec les résultats LES .	257
5.26	Résultats, pour différents schémas du transport d'un scalaire par un champs de vitesse	259
5.27	<i>Stencils</i> , S_k , candidats pour le schéma WENO de Jiang <i>et al</i> [52]	260
5.28	Comparaison de différentes formulations WENO pour le transport d'un scalaire A en 1D	262
5.29	Configuration du cas test pour la comparaison des schémas WENO/c et WENO/n en 3D	263
5.30	Champs de fraction de volume, Φ après plusieurs tours de boîtes.	264
5.31	Champs LES de fraction de volume résolue obtenus avec les schémas WENO/n et WENO/c	265
5.32	Comparaison des champs de $\bar{\Sigma}$ en DNS avec $\bar{\Sigma}_{min}$ obtenu LES	266
5.33	Comparaison des champs de densité d'interface LES/DNS	267
5.34	Profils de densité d'interface moyenne, cas $32^2 \times 256$	271
5.35	Profils de densité d'interface moyenne, cas $64^2 \times 512$	272
5.36	Profils de la densité d'interface, influence du Weber critique, We_c	273
5.37	Profils de la densité d'interface, influence de la vitesse d'injection, V_{inj} .	274
5.38	Comparaison d'un champ instantané de densité d'interface DNS filtré avec les résultats LES	275
A.1	<i>Stencils</i> candidats pour le calcul du flux avec la méthode WENO-JS . . .	287
A.2	<i>Stencils</i> candidats pour le calcul du flux avec la méthode WENO-JS . . .	288

Nomenclature

Caractères Latins

$\check{G}$	Filtre dans l'espace spectral
$\mathcal{L}_{ij}$	Tenseur de Léonard
$\mathcal{U}(r)$	Profil de vitesse à la sortie de l'injecteur
$\bar{S}_{ij}$	Tenseur des efforts résolus
$\bar{u}_{\Gamma\alpha}$	Vitesse moyenne de l'interface
$\vec{n}$	Normale
D_0	Diamètre d'injection
D_0	Diamètre du trou d'injection
D_g	Diamètre d'une goutte
D_{32}	Diamètre moyen de Sauter
D_{crit}	Diamètre critique pour une goutte
D_{exit}	Diamètre d'injection
D_{ij}	Tenseur des contraintes visqueuses
G	Noyau de convolution
IS_k	<i>Smoothness indicator</i>
k	Énergie cinétique turbulente
k_c	Nombre d'onde de coupure
k_e	Énergie cinétique turbulente
l_t	Longueur turbulente
L_{BU}	Longueur de pénétration liquide
l_{D32}	Échelle de longueur caractéristique (voir $D32$)
L_{inj}	Longueur de l'injecteur
Oh	Nombre d'Ohnesorge
P	Pression hydrodynamique

R_{ij}	Tenseur de Reynolds
Re	Nombre de Reynolds
Re_c	Nombre de Reynolds « collisionnel »
Re_g	Nombre de Reynolds « gazeux »
Re_l	Nombre de Reynolds « liquide »
Sc_t	Nombre de Schmidt
T	Température
t	Variable temporelle
u'	Fluctuation de vitesse
u'_i	Fluctuation de vitesse
U_d	Vitesse débitante
u_i	Composante de vitesse, direction i
V_{inj}	Vitesse d'injection
We	Nombre de Weber
We_c	Nombre de Weber « collisionnel »
We_g	Nombre de Weber « gazeux »
We_l	Nombre de Weber « liquide »
We_{crit}	Nombre de Weber d'équilibre

Caractères Grecs

χ_k	Fonction de phase
ΔP	Différentiel de pression entre l'amont et l'aval de l'injecteur
Δt	Pas de temps
Δ	Pas d'espace
δ_Γ	Fonction de Dirac associé à l'interface
δ_{ij}	Symbole de Kroenecker
Γ	Indice relatif à l'interface
κ	Courbure de l'interface
μ_k	Coefficient de viscosité dynamique de la phase k
ν_k	Coefficient de viscosité cinématique de la phase k
ν_t	Viscosité turbulente
ν_{SGS}	Viscosité de sous maille

Ω	Volume de contrôle
$\overline{\Delta}$	Longueur caractéristique du filtre
$\overline{\Sigma}$	Densité d'interface
Φ_k	Fraction de volume de la phase k
ρ_k	Masse volumique de la phase k
σ	Coefficient de tension de surface
τ	Terme de sous maille quelconque
τ_t	Temps turbulent
τ_{ij}	Tenseur de sous maille
τ_{ij}^a	Partie anisotrope d'un tenseur quelconque
θ	Angle de spray
ε	Taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente
φ	Fonction <i>level-set</i>
$\widehat{\Delta}$	Taille du filtre test

Acronymes

CAFE	<i>Coporate Average Fuel Economy</i>
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
CFL	<i>Courant-Friedrichs-Lewy</i>
CORIA	<i>Complexe de Recherche Interprofessionnel en Aérothermochimie</i>
DITurBC	<i>Downstream Inflow Boundary Conditions</i>
DNS	<i>Direct Numerical Simulation</i>
ELSA	<i>Euler-Lagrange pour Les Sprays en Atomisation</i>
ENO	<i>Essentially Non-Oscillatory</i>
GFM	<i>Ghost Fluid Method</i>
HCCI	<i>Homogeneous Charge Compression Ignition</i>
ISS	<i>Interface and Subgrid Scales</i>
LES	<i>Large Eddy Simulation</i>
LFS	<i>Large Filter Size</i>
PDF	<i>Probability Density Function</i>
PLIC	<i>Piecewise Linear interface Construction/Calculation</i>
RANS	<i>Reynolds Average Navier-Stokes</i>

RK	Runge-Kutta
SFS	<i>Small Filter Size</i>
SGS	<i>Subgrid Scale</i>
THI	Turbulence Homogène et Isotrope
VOF	<i>Volume of Fluid</i>
WENO	<i>Weighted Essentially Non-Oscillatory</i>

Opérateurs

$\llbracket \bullet \rrbracket_{\Gamma}$	Saut d'une grandeur à travers l'interface
$\langle \bullet \rangle$	Moyenne temporelle
$\langle \bullet \rangle^r$	Moyenne radiale
$\overline{(\bullet)}$	Opération de filtrage
$\star$	Produit de convolution
$S_{Dev}(\bullet)$	Variance
$\widehat{(\bullet)}$	Opération de filtrage, niveau test
$\widetilde{(\bullet)}$	Moyenne de Favre
$sign(\bullet)$	Fonction signe

Introduction générale

Avant-propos

PARMI les nombreuses peintures rupestres léguées par les hommes préhistoriques, principalement dans des grottes, il est une figure bien connue et particulièrement intéressante dite de « mains négatives », dont on retrouve des traces par milliers à travers le monde. On peut en voir une illustration sur la figure 1. Beaucoup de techniques sont envisageables pour obtenir un tel résultat, mais les tentatives de reproduction (c.f. [40]) montrent que, selon toutes vraisemblances, la méthode utilisée consistait à projeter un spray de peinture sur la paroi, la main servant alors de pochoir. Un mélange de pigments naturels et d'eau était atomisé directement par la bouche ou encore à travers un tube creux, souvent constitué de bois (sureau ou bambou selon les régions), d'os ou tout simplement de paille.

Ainsi, quoi qu'il ait voulu signifier l'*homo sapiens sapiens* qui, pour la première fois, laissa une trace de sa main, il est probable qu'il ait mis le phénomène d'atomisation à son profit dès cette époque. Et malgré l'apparente simplicité de mise en œuvre de cette méthode, il semble qu'obtenir un résultat satisfaisant soit difficile et requiert une certaine maîtrise technique.

Cette maîtrise, qui valait pour l'art pariétal, est toujours d'actualité car l'atomisation liquide/gaz a pris une place importante dans maintes applications industrielles où un contrôle fin de ce processus est nécessaire. Ceci est particulièrement vrai pour le sujet abordé dans ce mémoire, c'est-à-dire le phénomène d'atomisation au sein des moteurs à combustion interne où le carburant est injecté sous forme liquide. En outre, la compréhension et la prédiction du phénomène d'atomisation dans ce contexte est toujours un domaine très ouvert.



FIGURE 1 – Exemple d'application de l'atomisation liquide/gaz dans l'art pariétal.

Problématique et contexte de l'étude

Avec les normes EURO déjà en place ou encore CAFE (*Corporate Average Fuel Economy*) leurs pendants américains, le développement de moteurs à la fois moins polluants et plus économes en carburant est un défi. La mise au point de tel moteurs va donc requérir une analyse fine des phénomènes mis en jeu ainsi qu'un effort de modélisation conséquent. D'autant qu'avec l'arrivée d'EURO VI, dans un avenir proche, les contraintes liées à l'émission de polluants vont devenir plus sévères.

Dans ce contexte, le premier phénomène à comprendre, analyser et modéliser dans la chambre de combustion est l'atomisation. En effet, l'injection de carburant sous forme liquide est à l'origine de beaucoup de phénomènes mettant en jeu des interactions physiques complexes. Depuis l'atomisation jusqu'à la combustion des gaz. Par exemple, le régime de combustion et la structure des flammes dépendent directement de la fraction de gaz évaporé de la phase liquide. On comprend ici que le processus d'atomisation est un phénomène clef, contrôlant la dispersion du spray, l'évaporation, le mélange et la combustion au sein de la chambre.

Les expérimentations et les simulations numériques sont utilisées depuis maintenant plusieurs décennies pour étudier de la combustion sur des applications très variées [64]. Parmi ces applications, la modélisation dans les moteurs à combustion interne a connu un fort développement depuis quarante ans. Ceci étant dû à l'augmentation toujours croissante du nombre de véhicules [5]. Plus récemment, l'impact de la présence de la phase liquide, sous forme de spray de gouttes, a été mise en évidence. Depuis, la modélisation de sprays en évaporation a considérablement progressé et même si beaucoup de modèles ont vu le jour, il reste de nombreuses zones d'ombre.

Parce que l'atomisation met en jeu des interactions liquide/gaz complexes à travers l'interface de grandes difficultés apparaissent, tant d'un point de vue numérique qu'expérimental. En outre, il existe un manque de connaissance sur la formation et la topologie du jet liquide menant au spray dispersé à partir du système d'injection, phénomène dit d'atomisation primaire. En effet, la plupart des applications pratiques où le phénomène d'atomisation intervient impliquent des nombres de Reynolds et de Weber élevés. Les campagnes de mesures sont donc très difficiles à mener dans ces conditions. Au sein de la chambre de combustion, la tâche est particulièrement ardue, considérant la variété des liquides utilisés, la résolution spatiale ou temporelle nécessaire ou encore l'opacité optique pour le fuel utilisé dans les moteurs type diesel.

Dans ce contexte une des voies d'étude possible est l'analyse numérique. Pour résoudre le problème posé par les équations de Navier-Stokes, qui pilotent la dynamique d'un écoulement, trois grands formalismes ont été développés depuis l'avènement des premières machines à calculer : La simulation numérique directe (ou DNS pour *Direct Numerical Simulation*), le formalisme RANS (*Reynolds Average Navier-Stokes*) et la simulation aux grandes échelles (ou LES pour *Large Eddy Simulation*). D'abord développés pour des écoulements monophasiques ces formalismes nécessitent des adaptations pour rendre compte d'écoulements diphasiques. En effet, l'apparition d'une interface liquide/gaz requiert une attention toute particulière. Cela est d'autant plus vrai lorsque l'on considère les fortes variations de grandeurs physiques à travers l'interface (telle la masse volumique ou la viscosité), le phénomène de turbulence et

son interaction avec l'interface ou encore des phénomènes thermodynamiques fondamentaux comme l'évaporation et le transfert d'énergie sous forme de chaleur entre les phases.

Le formalisme DNS prend le parti de résoudre toutes les échelles caractéristiques de l'écoulement turbulent, depuis les échelles de Kolmogorov dites dissipatives jusqu'aux échelles intégrales contenant l'énergie. Cependant, en DNS, la prise en compte de toutes ces échelles impose une discrétisation spatiale très fine et par conséquent de fortes contraintes en terme de coût numérique. La simulation numérique directe reste alors limitée à des domaines de calcul relativement petits et des cas où le nombre de Reynolds turbulent est bas. Ainsi, bien qu'étant un outil précieux à des fins de validation et de compréhension, l'application de la DNS sur des configurations industrielles reste difficilement envisageables. De plus, concernant les écoulements liquide/gaz, il faut user d'algorithmes spécialement conçus pour traiter l'interface liquide/gaz et les sauts à travers cette dernière, ce qui alourdit le coût numérique déjà important de la DNS.

Conséquemment, des méthodes ont été développées afin de réduire le nombre de degrés de liberté nécessaires à la description d'un écoulement. C'est ce que proposent les formalismes RANS et LES. Cependant, cette réduction de la complexité nécessite en contrepartie un effort de modélisation important.

Le formalisme RANS (*Reynolds Average Navier-Stokes*) consiste à ne calculer que les grandeurs moyennées (statistiquement) de l'écoulement. Les équations à résoudre ne portant que sur celles-ci, cela permet de réduire de façon significative le coût numérique dans ce formalisme. De ce fait, l'utilisation de la RANS est privilégiée dans beaucoup d'applications industrielles. Néanmoins, ce formalisme impose souvent de modifier les modélisations en fonction de l'écoulement que l'on souhaite résoudre, on parle ainsi de manque d'universalité des modèles.

Le formalisme LES, quant à lui, propose de résoudre seulement la partie basse fréquence d'un écoulement, correspondant aux plus grandes échelles de celui-ci. Ce faisant, seule la partie haute fréquence (*i.e.* petites échelles) nécessite une modélisation. La distinction entre les grandes échelles et les plus petites se fait à partir d'une échelle dite de coupure. Celle-ci est choisie de façon à ce que les structures modélisées soient peu énergétiques et relativement découplées de l'écoulement moyen, facilitant leur modélisation. De fait, la réduction du nombre de degrés de liberté est moindre qu'avec le formalisme RANS, si bien que l'effort numérique est supérieur. Néanmoins, considérant que plus de physique est résolue en LES, les résultats sont souvent plus précis et garantissent une relative indépendance des modèles vis-à-vis de l'écoulement traité. En outre, pour les applications moteurs le LES peut permettre de capturer des phénomènes qui varient d'un cycle à l'autre [131], ce que n'autorise pas le formalisme RANS. Cette capacité de la LES à rendre compte d'écoulements 3D contenant des phénomènes instationnaires couplés avec la turbulence suscite, ainsi, un intérêt croissant de la part des industriels.

Néanmoins, la prise en compte de l'atomisation primaire reste un « challenge », aussi bien en RANS qu'en LES. Principalement parce qu'il est difficile d'estimer dans quelle mesure les phénomènes interfaciaux influent sur le comportement moyen de l'écoulement dans le cas RANS, ou encore sur les grandes échelles en LES. De plus le

manque de données expérimentales, évoqué plus haut, rend la modélisation difficile.

Beaucoup de modèles ayant été développés pour les sprays dispersés (transport de gouttes sous l'influence de l'écoulement gazeux), une solution souvent adoptée est de considérer l'atomisation primaire comme une condition limite de l'écoulement sur laquelle les gouttes sont initiées (en terme de rayon, vitesse, *etc*) à partir d'une analyse phénoménologique du problème. Cette solution impose souvent de s'adapter aux conditions d'injections que l'on cherche à simuler. On comprend, dès lors, que résoudre l'écoulement dans la zone primaire pourrait permettre de construire un outil de prédiction beaucoup plus général.

Pour ce faire, le formalisme LES est un candidat très prometteur, en permettant une résolution spatiale relativement élevée avec un temps de restitution toutefois plus court qu'en simulation numérique directe. Pourtant bien développée et utilisée pour des écoulements monophasiques, ce formalisme est encore largement inexploré dans le cadre de l'atomisation primaire. C'est donc dans ce contexte que s'inscrit l'objectif de cette étude, c'est-à-dire le développement d'un modèle LES capable de résoudre l'atomisation, depuis la zone primaire jusqu'au spray dispersé. Constituant une première approche, l'intégration de cette modélisation dans un solveur académique (ARCHER [90]) va permettre d'estimer, d'une part, dans quelle mesure l'approche développée permet de rendre compte de la dispersion du spray ou encore des échelles caractéristiques de celui-ci. Et d'autre part, de mettre en lumière les difficultés rencontrées, à la fois en termes de modélisation mais également au niveau des méthodes numériques.

Plan du document

Le présent mémoire se compose de cinq chapitres. Les deux premiers constituent une étude bibliographique et un état de l'art. Dans les trois derniers l'essentiel de la contribution de ce travail de thèse est détaillé.

Chapitre 1 - Contexte de l'étude et notions fondamentales

Ce chapitre porte principalement sur la physique du fractionnement d'un jet liquide. Les études expérimentales vont nous permettre de mettre en lumière les différents phénomènes à l'origine de l'atomisation et les régimes que l'on peut identifier dans ce type d'écoulements. Les nombres sans dimensions nécessaires à la caractérisation d'un spray sont introduits. On évoquera également les difficultés rencontrées pour étudier expérimentalement l'atomisation dans des conditions proches de l'injection moteur.

Chapitre 2 - Revue des modèles d'atomisation

Ce chapitre revient sur les concepts inhérents aux différents formalismes DNS, RANS et LES. Ensuite, les principales approches développées et/ou mises en œuvre pour modéliser l'atomisation primaire dans ces trois formalismes sont détaillées. En outre, l'étude de travaux utilisant l'approche LES met en lumière la potentialité de ce formalisme pour la description de ce type d'écoulement.

Chapitre 3 - Simulation aux grandes échelles : modélisations et tests de sous maille

Le formalisme LES appliqué aux écoulements diphasiques est détaillé dans ce chapitre. Le filtrage des équations (monophasiques dans un premier temps puis diphasiques) permet de mettre en évidence les termes de sous mailles inhérents à ce type de formalisme. La suite du chapitre se consacre à l'étude de ces termes non fermés à partir de résultats DNS (tests *a priori*). La hiérarchisation de ces termes permet d'estimer l'importance relative et donc la contribution de chacun dans les équations de transport. L'aspect modélisation est ensuite abordé, notamment en évaluant les principaux modèles afin de déterminer ceux potentiellement utilisables en LES, dans le cas précis de l'atomisation.

Chapitre 4 - Développement d'un modèle d'atomisation pour la LES

Ce chapitre présente le développement d'un modèle LES spécifiquement consacré à l'atomisation. Dans un premier temps on montrera la nécessité de modéliser les termes de sous maille inhérents à l'aspect liquide/gaz afin de faire le lien entre la vision résolue de l'interface et le spray de sous maille. Le principe général du modèle est alors présenté, ainsi que sa mise en œuvre dans un solveur Navier-Stokes. Enfin, basé sur des travaux antérieurs issus du formalisme RANS, la construction d'une équation de transport de la quantité d'air interfaciale en LES est détaillée, celle-ci permettant notamment d'obtenir les échelles caractéristiques du spray de sous-maille.

Chapitre 5 - Résultats du modèle LES d'atomisation

Les principaux résultats obtenus avec le modèle LES d'atomisation, développé durant cette thèse, sont exposés dans ce dernier chapitre. Sur une configuration proche de l'injection Diesel, les résultats sont comparés à ceux obtenus avec une simulation DNS. On compare également les résultats du modèle avec ceux issus d'une modélisation disponible dans la littérature (LES/VOF). On cherche, en outre, à savoir dans quelle mesure le nouveau modèle permet de rendre compte de la dispersion moyenne du spray et des échelles caractéristiques de celui-ci. Des grandeurs plus globales sont également observées, telles la longueur de liquide intacte ou encore l'angle de spray. Enfin, les spécificités des méthodes numériques, liées à la LES des écoulements liquide/gaz, sont étudiées ainsi que leurs implications sur les résultats obtenus.

Chapitre 1

Contexte de l'étude et notions fondamentales

DANS ce chapitre nous introduirons le contexte de notre étude. C'est-à-dire le processus d'injection au sein des moteurs à combustion interne. On s'attardera plus spécifiquement sur le cas des moteurs Diesel modernes. Plusieurs observations et études issues de l'expérience vont nous permettre de mettre en lumière les mécanismes de déstabilisation d'un jet liquide conduisant à la production d'un spray de gouttelettes dans la chambre de combustion. En outre, ces différentes études montrent la présence d'une zone dense proche injecteur, qui reste encore difficile à caractériser de façon expérimentale.

1.1 Généralités sur l'injection dans les moteurs Diesel

D'une manière générale les combustibles liquides utilisés dans de nombreux systèmes de combustion, doivent être pulvérisés en fines gouttelettes dans le but d'augmenter la surface de contact du liquide avec les gaz chauds et ainsi faciliter une rapide évaporation et le mélange avec l'oxydant, ce mélange étant un facteur déterminant pour le processus de combustion.

On cherche donc à obtenir un spray de gouttelettes fines, et ceci se fait à travers le processus d'atomisation. En effet, on définit un spray comme étant un écoulement de gouttes individuelles évoluant dans un milieu gazeux ambiant. Chacune des gouttes possède des paramètres qui lui sont propres (vitesse, diamètre, *etc*) et est susceptible d'interagir avec d'autres (collision, coalescence). Le processus d'atomisation constitue le mécanisme par lequel la quantité d'interface liquide/gaz (ou aire interfaciale) augmente au sein d'un volume de contrôle donné ou encore que le ratio surface sur la masse dans le liquide augmente (comme défini par Mansour *et al* [84]).

Ainsi, au sein des moteurs à combustion interne, qu'ils soient à allumage commandé ou de type Diesel, l'atomisation fait partie du processus global de combustion et joue un rôle primordial pour celle-ci. On peut ainsi représenter les étapes menant à la combustion au sein d'un système de combustion à partir de l'injection comme sur le schéma présenté sur la figure 1.1, où l'on compte l'atomisation proprement dite qui conduit à la formation du spray de gouttelettes. Puis celles-ci sont dispersées sous

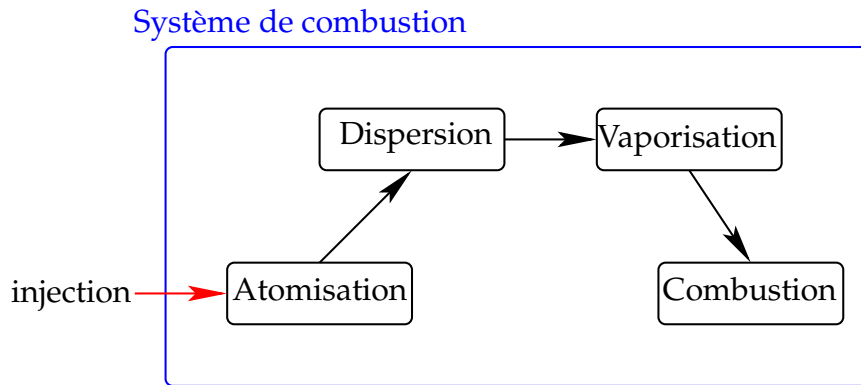


FIGURE 1.1 – Schéma des étapes menant d'un jet liquide, depuis l'injection, à un mélange gazeux inflammable, au sein d'un système de combustion.

l'effet de l'écoulement du gaz environnant et des multiples interactions entre elles. Enfin, elles se vaporisent et la combustion peut avoir lieu.

Il faut souligner que quel que soit le système d'injection choisi l'atomisation correspond à un milieu diphasique nécessairement dense à certains endroits. Ainsi le processus d'atomisation est schématisé d'une manière très générale sur la figure 1.2. On distingue alors la zone dense issue de l'injecteur qui conduit à une zone diluée où l'on relève la présence de gouttes sphériques. Un des critères mathématiques permettant de discriminer la frontière entre ces deux zones est la fraction de volume, Φ_k , qui donne le rapport entre le volume de la phase k sur un volume de contrôle donné, Ω :

$$\Phi_k = \frac{\text{Volume de la phase } k \text{ compris dans } \Omega}{\text{Volume de } \Omega}, \quad \text{soit } \Phi_k \in [0 ; 1] . \quad (1.1)$$

Une valeur unitaire de Φ_k signifie que Ω est rempli totalement avec la phase k . *A contrario* une valeur nulle indique son absence. Ainsi, la zone dense constitue une zone dans laquelle la fraction volumique de liquide est très élevée et où la topologie des structures liquides est très souvent connexe. Dans le cas de l'atomisation, la valeur de la fraction de volume communément admise pour considérer le spray comme dilué est de 0.1. L'hypothèse sous-jacente à la définition de la zone diluée est que dans cette partie du spray les gouttes sont sphériques et n'ont plus d'interactions (collision, etc) entre elles, on peut alors les considérer comme des entités individuelles en interaction avec le gaz porteur.

D'une manière générale on distinguera également l'atomisation dite primaire de l'atomisation secondaire :

Atomisation primaire : Cette étape de l'atomisation rend compte des mécanismes à l'origine de la déformation de l'écoulement liquide dense à la sortie de l'injecteur jusqu'à la production des premières structures détachées (*i.e.* filaments et gouttes).

Atomisation secondaire : Cette étape est relative à la désintégration des gouttes en gouttes plus petites, due aux forces aérodynamiques générées par la vitesse relative, u_{rel} , entre celles-ci et le gaz environnant.

Ainsi, l'atomisation primaire est donc plutôt associée à la zone dense en proche

sortie d'injecteur, tandis-que l'atomisation secondaire est relative au phénomène de fractionnement des gouttes dans la zone diluée, comme cela est visible sur la figure 1.2.

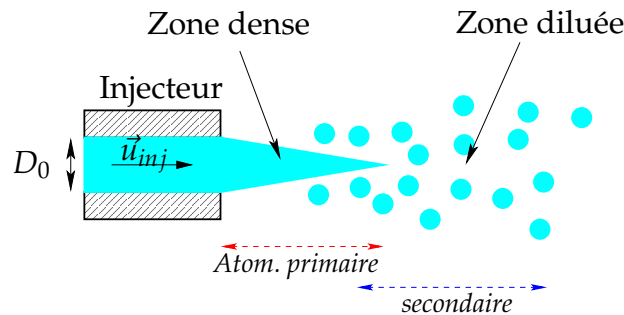


FIGURE 1.2 – Représentation schématique d'un jet liquide haute pression, avec la présence d'une zone dense proche injecteur et d'une zone diluée composée de gouttes liquides sphériques.

Sans rentrer dans tous les détails techniques de l'injection dans la chambre de combustion des moteurs de type Diesel, il est possible de mettre en lumière quelques points qui vont nous permettre de situer le contexte de notre étude du point de vue du secteur automobile. En outre, depuis un passé relativement récent, l'apparition de l'injection directe a permis, en grande partie, l'amélioration de la combustion et la diminution des émissions de polluants. De plus, associée au système à « rampe commune » (ou *common rail*) et à la régulation électronique des débits, l'injection peut en elle même, être plus finement contrôlée et laisse une grande latitude de réglage aux motoristes. Cependant, avec des géométries d'injecteurs de plus en plus complexes et de très hautes pressions d'injection, la maîtrise totale de la combustion reste difficilement accessible. On revient donc sur quelques points importants.

1.1.1 Évolution des systèmes d'injection

Aujourd'hui presque totalement abandonnée dans le secteur automobile, l'injection indirecte était pourtant le système d'injection privilégié jusqu'à peu. Ce type d'injection utilise le principe des chambres divisées, c'est-à-dire que la combustion se déroule dans 2 chambres séparées, ce que l'on peut voir sur la figure 1.3(a). Une chambre, représentant 30 à 60 % du volume total, reçoit l'injection qui sous l'effet de la chaleur s'évapore et amorce la combustion et une chambre principale dans laquelle elle s'achève. Le combustible vaporisé étant chassé de la préchambre par l'augmentation de pression. Ce type d'injection présente l'avantage d'un bruit de fonctionnement relativement faible, mais ceci au détriment d'une légère surconsommation engendrant des émissions de polluants assez élevées par rapport aux limites actuellement imposées.

Les chocs pétroliers successifs et les normes de pollution, telles les normes EURO, de plus en plus restrictives ont motivé les motoristes et constructeurs à repenser le moteur Diesel en terme d'économie de carburant et de faible pollution. Et ceci passe par une refonte quasi complète de l'injection et des systèmes périphériques associés. On pense bien sûr à l'injection directe avec « rampe commune ». Ainsi, l'injection directe consiste à injecter directement le carburant dans la chambre de combustion,

figure 1.3(b). Cette configuration s'impose, face à l'injection indirecte, notamment par un rendement supérieur, ceci pouvant s'expliquer par l'absence de préchambre ce qui diminue le rapport entre la surface et le volume de la chambre de combustion et donc les pertes thermiques aux parois, mais aussi par le fait que la durée de combustion est beaucoup plus faible. Finalement, il convient de souligner que les pertes de charge au passage de la préchambre sont également évitées participant également au rendement plus favorable de l'injection directe.

La technologie à « rampe commune » permet, de son côté, contrairement aux anciens systèmes à pompes distributrices, d'avoir une pression d'injection indépendante du régime moteur et constante durant la phase d'injection. Associé à un pilotage électronique, le système complet d'injection (injection directe + *common rail*) a permis d'imaginer une multitude de stratégies d'injection. Par exemple, l'injection est souvent fractionnée en plusieurs « sous » injections, notamment une pré-injection qui permet de réduire les bruits de combustion et les émissions de *Nox*. On pense également au concept d'« HCCI » (pour *Homogeneous Charge Compression Ignition*), visant à enflammer un mélange air carburant par compression dans le cylindre. Ou encore aux charges stratifiées permettant d'obtenir un gradient de richesse dans le cylindre. (Cependant on ne détaillera pas ces stratégies, le lecteur intéressé pourra se reporter à l'ouvrage de Baumgarten [5]).

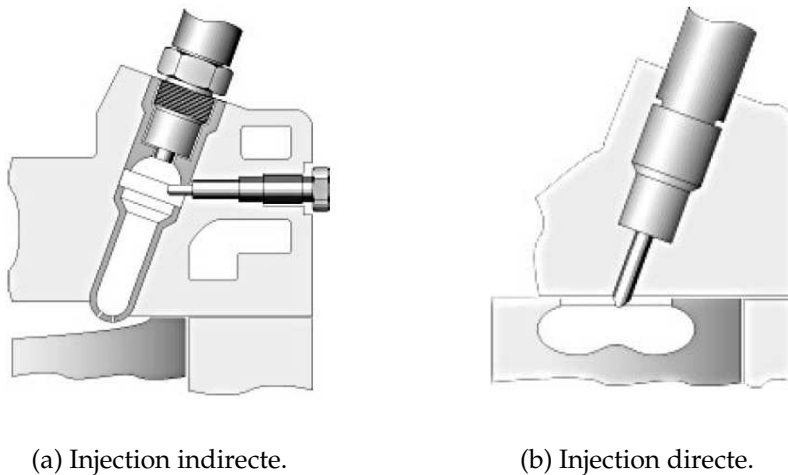


FIGURE 1.3 – Deux types d'injections rencontrées dans les moteurs Diesel.

Au final, il convient de souligner que l'adoption de l'injection directe s'est accompagnée de l'émergence d'injecteurs hautes pressions capables de produire un spray très rapidement avec des vitesses d'injections élevées. En effet, dans certaines configurations la pression d'injection peut atteindre 2000 bar pour des vitesses d'injection de 400 à 500m.s^{-1} , et parfois même plus. Ceci est une nécessité au regard du fait que, la plupart du temps dans cette configuration, l'injection a lieu en même temps que la combustion (pleine charge) ou très tard durant la phase de combustion (cas de charge partielle). On dispose donc de peu de temps dans tous les cas pour obtenir un spray

dilué et un mélange homogène. L'injection fait alors partie intégrante du processus de combustion et peut difficilement, en tout état de cause, être découplée de ce dernier contrairement à ce qui est illustré sur la figure 1.1.

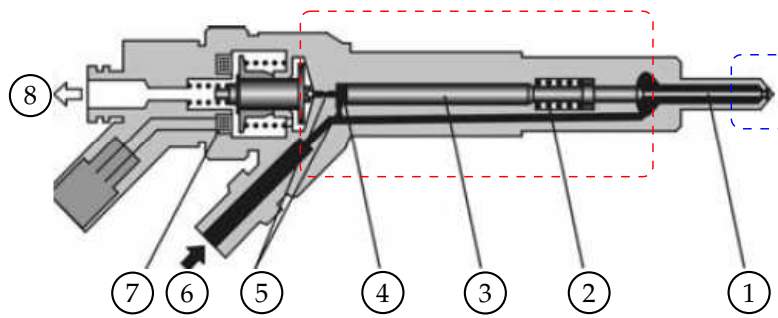
1.1.2 Les injecteurs *common rail*

La figure 1.4(a) montre le schéma d'un injecteur *common rail* typique. On voit que ce dernier est composé de beaucoup d'éléments dont on retiendra les suivants pour nos propos :

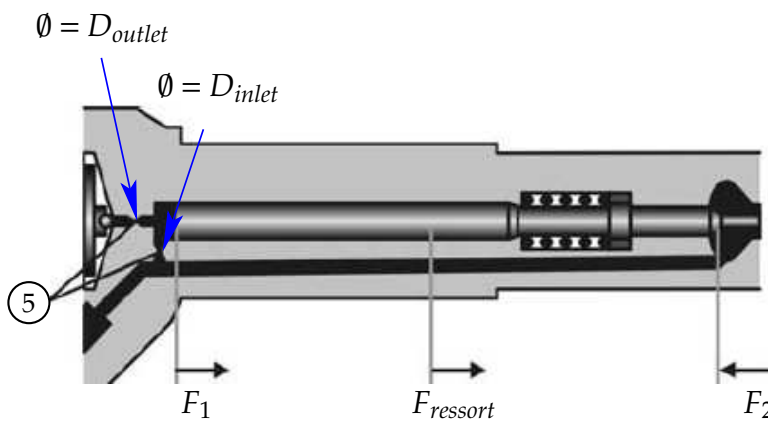
- ① : Aiguille,
- ② : ressort,
- ③ : tige de liaison,
- ④ : chambre de contrôle,
- ⑤ : étranglement,
- ⑥ : raccord d'entrée de pompe (haute pression),
- ⑦ : électrovanne,
- ⑧ : raccord de retour au réservoir.

On détaille quelque peu son fonctionnement : notons, en premier lieu, que l'injection se fait au nez de l'injecteur situé à droite sur le schéma 1.4(a) et que celui-ci est en position fermée sur cette même figure. C'est la levée de l'aiguille qui va induire la décharge de liquide au sein de la chambre de combustion. Dans cette position fermée les forces combinées du ressort, $\vec{F}_{\text{ressort}}$, et hydraulique, $\vec{F}_1$, au niveau de la chambre de contrôle (s'exerçant sur la tige de liaison) sont supérieures à la force hydraulique, $\vec{F}_2$, qui s'exerce sur l'aiguille (c.f. figure 1.4(b)). Pour initier l'injection, l'électrovanne s'ouvre, la pression dans la chambre de contrôle chute alors et l'aiguille commence à s'ouvrir. Ceci vient du fait que le goulot d'étranglement relié à la pompe haute pression a une dimension inférieure à celui situé derrière la chambre de contrôle. Le fuel en excès retourne alors au réservoir par ce goulot d'étranglement. On comprend dès lors que, dans ce type d'injecteur, le mouvement de l'aiguille est contrôlé de façon hydraulique. La vitesse d'ouverture de celle-ci est déterminée par le rapport, $D_{\text{inlet}}/D_{\text{outlet}}$, des dimensions des goulots d'étranglement. Le processus de fermeture est initié par la coupure de l'électrovanne, la pression dans la chambre de contrôle augmentant. L'aiguille se referme celle-ci étant reliée à la tige de liaison. De la même manière que précédemment la vitesse de fermeture est déterminée par le rapport $D_{\text{inlet}}/D_{\text{outlet}}$.

L'exemple de la figure 1.4 est un injecteur multi-trous, c'est-à-dire que le nez de l'injecteur possède, disposés en cercle, plusieurs trous cylindriques ou buses par lesquels la décharge de liquide va se produire lors de la levée de l'aiguille. Cet injecteur produit plusieurs sprays simultanément, issus des différentes buses d'injections. Certains injecteurs disposent de 6 voir 7 buses sur le nez de l'injecteur. Le diamètre, D_0 , de ces buses d'injection peut varier d'un injecteur à l'autre, notons tout de même que l'ordre de grandeur est de $100\mu\text{m}$. À titre d'exemple, la figure 1.4(c) présente une photo du nez de l'injecteur où 3 buses d'injection sont visibles. Notons qu'il existe bien d'autres types d'injecteurs tels les injecteurs à *swirl* ou à nappes coniques.

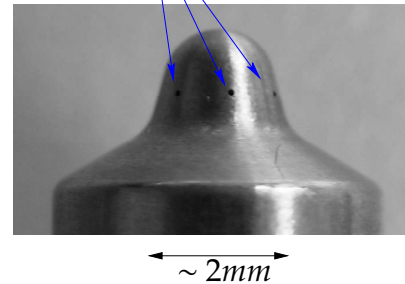


(a) Schéma d'un injecteur *common rail* [38], le fuel est de couleur noire.



(b) Zoom de la zone bleu en (a), avec les différentes forces.

Buses d'injection



(c) Photo du nez de l'injecteur, 3 buses d'injection sont visibles (flèches).

FIGURE 1.4 – Schéma d'un injecteur *common rail* (a) et visualisation des buses d'injection (b).

1.2 Quelques observations expérimentales

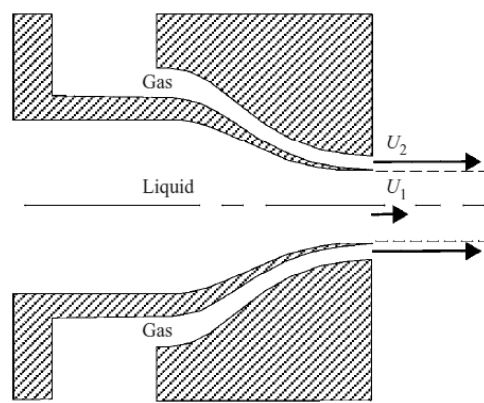
On présente dans cette partie des observations expérimentales réalisées dans le cadre de l'injection liquide/gaz proche injecteur. Un premier exemple va nous permettre, pour un jet liquide à faible vitesse d'injection, de montrer de façon qualitative les mécanismes qui mènent à la formation des premières gouttes à partir de la colonne liquide sortant de l'injecteur.

L'augmentation de la vitesse d'injection, en se rapprochant de l'injection Diesel, va mettre en lumière les difficultés expérimentales liées à ce type d'étude. Ainsi il est souvent difficile d'obtenir des informations quantitatives sur l'atomisation primaire. Néanmoins des avancées relativement récentes mettent en évidence l'existence d'un cœur liquide qui peut s'étendre loin dans l'injection.

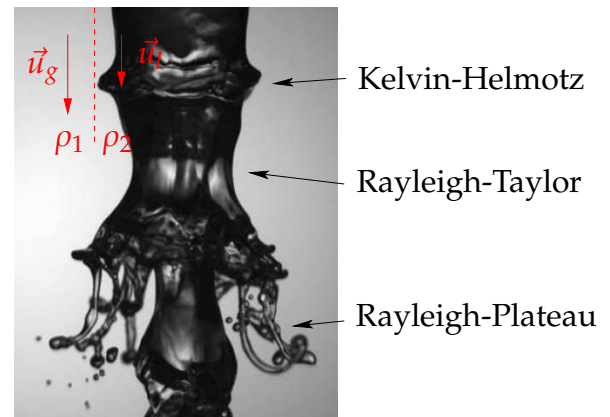
1.2.1 Un premier exemple

La figure 1.5(b) présente une visualisation obtenue par Marmottant *et al* [86] pour un jet coaxial. Le liquide est issu d'une buse cylindrique entourée d'un *cow-flow* d'air plus rapide, le schéma sur la figure 1.5(a) présente la configuration expérimentale. Dans cet exemple les dimensions sont bien supérieures à celles rencontrées pour l'injection Diesel mais il met clairement en évidence les ingrédients du processus d'atomisation.

En effet, on peut voir sur cette figure comment le jet rond se transforme en fines gouttelettes. Initialement, il existe un fort cisaillement entre le jet liquide et le jet coaxial d'air ce qui permet de développer une instabilité de type Kelvin-Helmholtz qui forme les ondulations initiales, le mécanisme de cette instabilité est illustré sur la figure 1.6(c). Ensuite, la frontière liquide/gaz subit des accélérations, comme il y a un saut de masse volumique au travers de l'interface cette situation est instable (Rayleigh-Taylor) et il se forme des ligaments (c.f. figures 1.6(a) et 1.6(b)). Finalement ces ligaments sont des cylindres liquides, ils se déstabilisent pour former des gouttes, c'est une instabilité de type Rayleigh-Plateau.



(a) Schéma d'un l'injecteur coaxial.



(b) Visualisation du jet liquide

FIGURE 1.5 – Déstabilisation d'un jet liquide par un écoulement d'air coaxial (résultats de Marmottant *et al* [86]). Il est possible d'observer sur cette image 3 types d'instabilités qui conduisent à la formation de gouttes. $U_1 = 0.6m.s^{-1}$, $U_2 = 35m.s^{-1}$, diamètre de l'injecteur $D_1 = 7.8mm$ et épaisseur du *cow-flow* $h = 1.7mm$.

Cet exemple nous a permis de mettre en lumière de façon relativement claire la présence d'un cœur liquide proche du nez de l'injecteur et d'illustrer les processus qui agissent sur l'interface liquide/gaz pour produire les premières gouttes. Mais il convient de préciser que les conditions expérimentales de cet exemple sont encore loin des conditions de vitesse et de pression d'injection que l'on peut rencontrer au sein des moteurs Diesel. Comme cela a déjà été mentionné, dans ce cas l'injection se fait à haute vitesse afin de diminuer le temps nécessaire au processus d'atomisation et les phénomènes qui étaient observables sur la figure 1.5(b) deviennent beaucoup plus difficiles à caractériser.

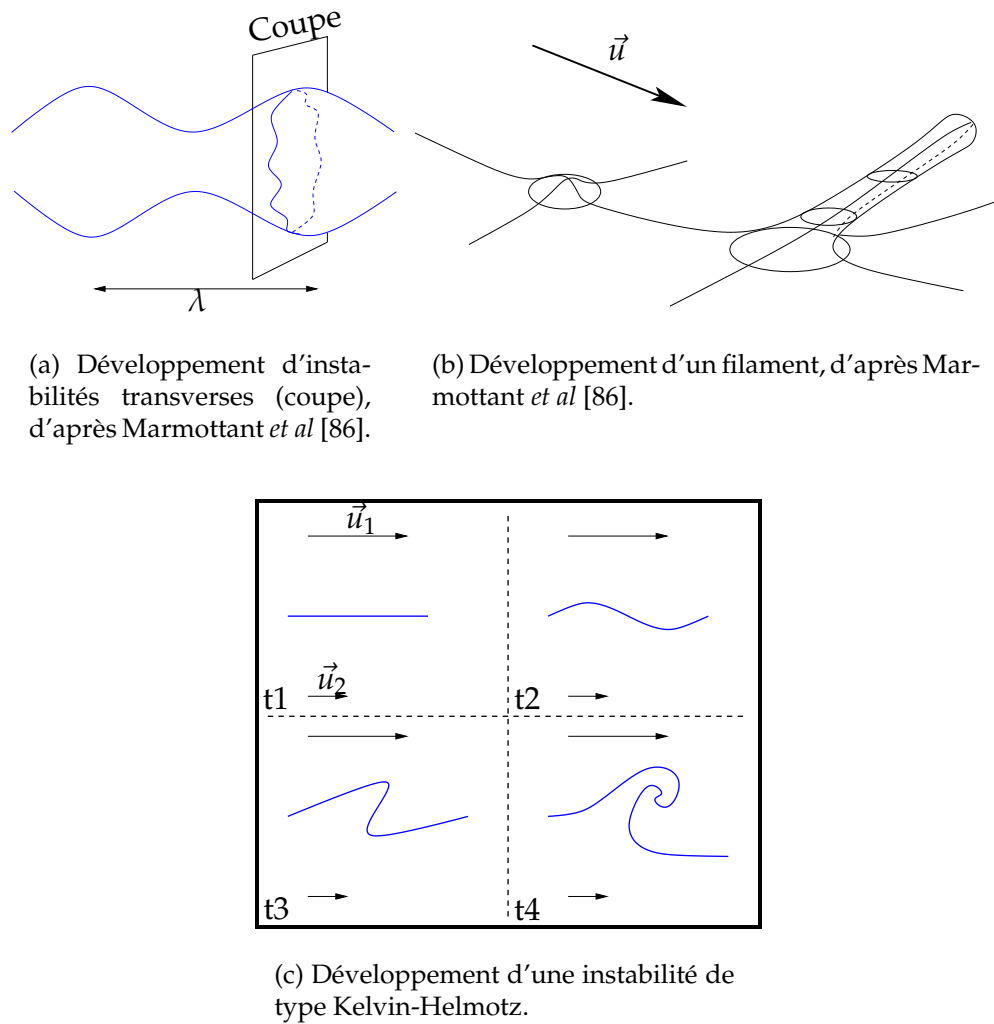


FIGURE 1.6 – Différents processus d'instabilités intervenant sur l'interface liquide/gaz.

En effet, toujours dans le cas d'un injecteur coaxial, la figure 1.7 montre qu'à mesure que l'on augmente la vitesse des gaz, les structures de l'écoulement deviennent de plus en plus petites et l'atomisation a lieu plus proche de l'injecteur. Il devient alors difficile d'appréhender expérimentalement les détails de l'écoulement. C'est donc le cas des jets coaxiaux à forte vitesse, mais également des jets issus d'un simple trou comme pour l'injection Diesel. Ce que nous allons tenter d'illustrer dans la section suivante en se rapprochant des conditions rencontrées dans les moteurs.

1.2.2 Mise en évidence d'un cœur liquide

Dès 1997, Fath *et al* [32] mettent en évidence la présence d'un cœur liquide en comparant le signal issu d'un cylindre de liquide intact à celui issu d'un spray Diesel. Leurs travaux mettent également en lumière la présence d'une phase dispersée constituée de gouttelettes autour du cœur liquide ainsi que la présence de bulles de cavitation au sein de celui-ci.

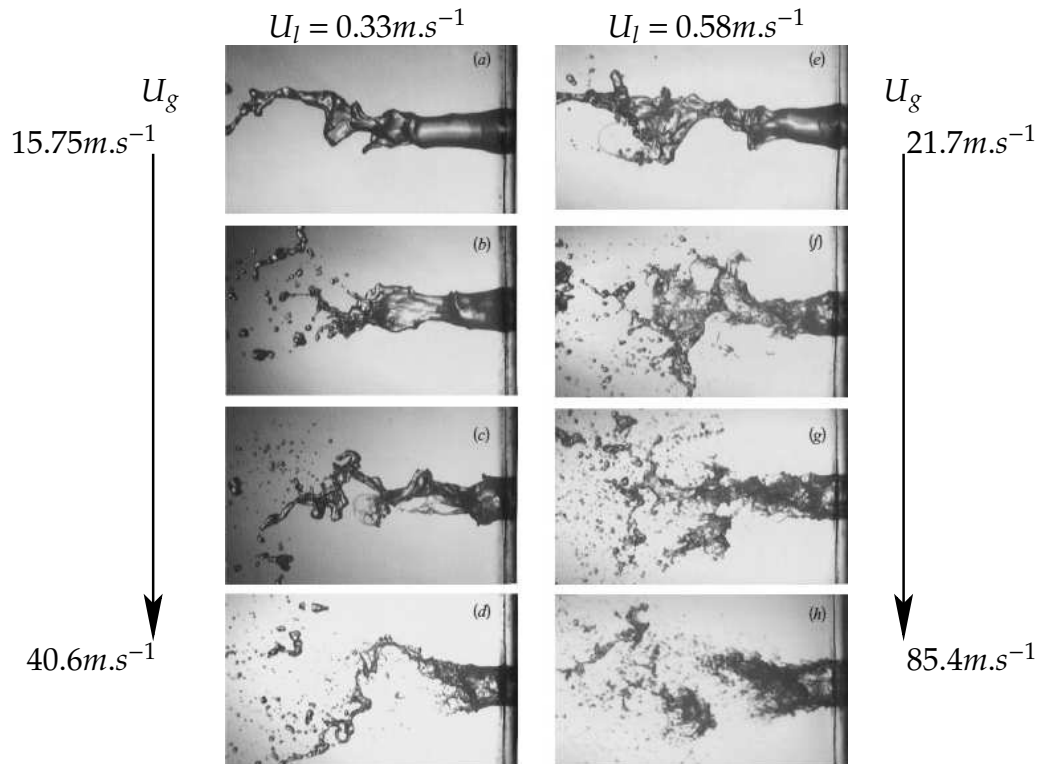


FIGURE 1.7 – Atomisation de jets coaxiaux pour différentes vitesses de liquide, U_l , et de gaz, U_g . Résultats de Lasheras *et al* [62].

Il convient de noter que cette zone, proche injecteur, reste tout de même très difficile à étudier expérimentalement. En effet, cette zone, réduite dans l'espace à quelques diamètres de jet, se révèle optiquement difficile d'accès, car souvent les expériences sont réalisées dans un milieu pressurisé afin de reproduire les conditions moteur. De plus, les carburants utilisés dans les moteurs sont souvent optiquement dense et la présence d'une phase dispersée autour du cœur liquide complique la tâche. Soit en cachant simplement celui-ci, soit en provoquant des réflexions et des réfractions importantes et multiples dont il est difficile de connaître clairement l'origine. À cela s'ajoute le fait que les phénomènes en présence ont des temps caractéristiques très courts, et nécessitent donc une résolution temporelle élevée. Si bien que cette zone dense près du nez de l'injecteur est très souvent décrite de manière qualitative.

Même en considérant les mesures réalisées loin de l'injecteur, telles que celles obtenues par la technique PDA (*Phase Doppler Anemometry*) qui vise à extraire les distributions en tailles ainsi que les composantes de vitesse individuelles des gouttes dans la zone d'atomisation secondaire, il est difficile de relier les informations obtenues avec les processus à l'œuvre dans l'injecteur et/ou près de sa sortie car ceux-ci sont souvent masqués par l'historique des interactions dans la zone d'atomisation secondaire.

Néanmoins, afin d'obtenir des informations sur l'écoulement dans la zone dense, plusieurs techniques de mesures ont été développées et pour certaines très récemment, on peut citer de manière non exhaustive : la fluorescence induite par laser [122], sonde optique [17], mesure de vitesse LCV (*Laser Correlation Velocimetry*) [18], mesure par rayon-X [144, 15], imagerie balistique [76, 47], ou encore l'analyse d'image [10].

Ainsi les figures 1.8 et 1.9 présentent des résultats obtenus par Idlahcen *et al* [46, 47] en utilisant l'imagerie balistique sur un jet Diesel dans une chambre pressurisée ($\sim 800\text{bars}$). Cette technique consiste à capter uniquement les photons transmis directement (donc appelés « balistiques »), émis depuis une source *laser* et traversant le jet. On s'affranchi de ceux diffusés par les différentes structures (gouttes dispersées) grâce à une porte temporelle qui laisse passer les photons « balistiques » mais se referme avant l'arrivée des photons diffusés. La figure 1.8 présente l'avantage de comparer cette technique à la technique d'ombroscopie souvent utilisée auparavant. L'imagerie balistique, en (a) et (b), montre clairement la présence d'un cœur liquide issu de l'injecteur, et qui s'étend assez loin en aval de celui-ci. Sur ces images on peut deviner la formation de filaments menant à l'arrachement des premières gouttelettes. *A contrario*, les résultats par ombroscopie, en (c), sur le même jet mettent en lumière les difficultés rencontrées pour visualiser le cœur liquide et encore plus les structures ligamentaires avec cette technique. En effet on se rend compte que tout ou partie de l'écoulement est masqué par la présence d'une phase dispersée autour de la colonne liquide.

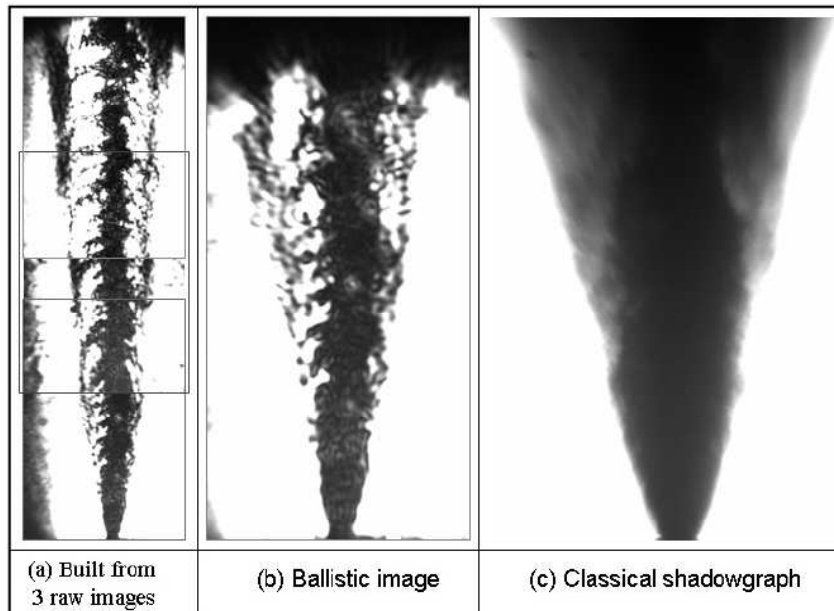


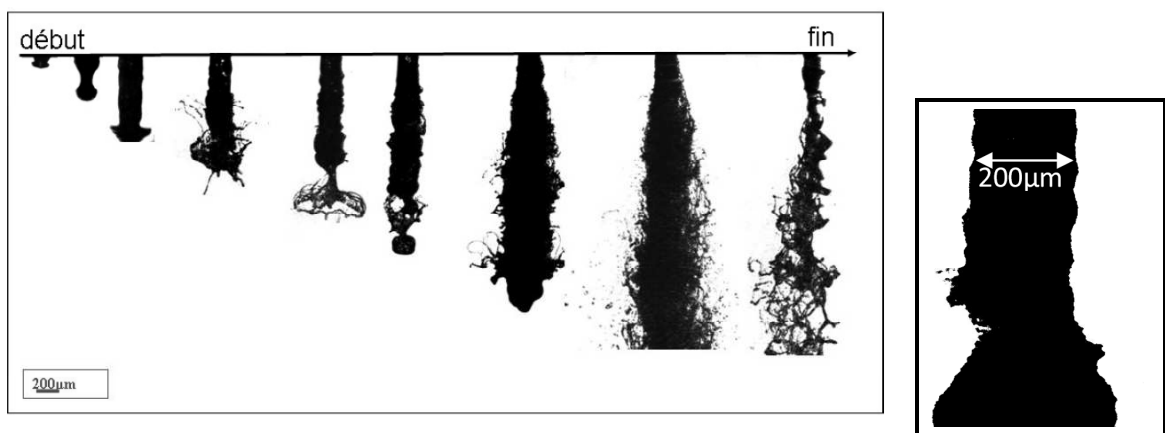
FIGURE 1.8 – Comparaison entre l'imagerie balistique (a & b) et l'ombroscopie (c) pour un jet Diesel haute pression, résultats de Idlahcen *et al* [46].

L'imagerie balistique, comme beaucoup de méthodes de visualisation proche injecteur, en est encore au stade expérimental. En outre, cette méthode requiert des réglages très fins¹ et ne permet pas encore d'obtenir une résolution temporelle suffisante pour accéder à tous les détails de l'atomisation primaire. Cependant, il est possible d'obtenir des images de différentes injections à différents temps d'injection. C'est ce que proposent Idlahcen *et al* [46, 47] sur la figure 1.9(a). Sans pour autant constituer une réelle « évolution temporelle », cette figure apporte tout de même des informations

1. Notamment au niveau de la synchronisation entre le faisceau traversant le jet et l'ouverture de la porte temporelle.

intéressantes sur la formation du jet depuis sa sortie de l'injecteur. Le tout début d'injection (3-4 premières images) montre des déformations importantes de l'interface ainsi qu'une structure en forme de champignon en tête de la colonne liquide et l'apparition des premiers filaments. Ensuite, l'interface liquide/gaz possède une géométrie fort complexe où il est difficile d'identifier les types d'instabilités à l'origine de ces déformations. La dernière figure, en fin d'injection, n'a presque plus de phase dispersée (en terme de gouttes) mais fait montre d'une structure liquide extrêmement torturée et constituée de filaments qui semblent être connexes.

La figure 1.9(b) propose une image binarisée d'une mesure réalisée en très proche injecteur, on peut y voir une grande variété d'échelles spatiales en terme de déformation de l'interface liquide/gaz, traduisant l'effet combiné des différentes instabilités.



(a) Visualisations d'un jet Diesel à différents temps d'injection (chaque image correspond à une injection différente).

(b) Visualisation instantanée d'un jet Diesel proche injecteur.

FIGURE 1.9 – Résultats de Idlahcen *et al* [47] obtenus par imagerie balistique.

1.3 Description du phénomène physique

Techniquement, il existe une multitude de façons d'atomiser un jet liquide, tout domaine confondu. Par exemple, par l'intermédiaire de son énergie cinétique, soit en l'exposant à un jet gazeux, ou encore de façon mécanique, ceci expliquant la grande variété d'injecteurs que l'on peut trouver.

Mais dans tous ces cas, d'un point de vue physique, le jet liquide fait face à nombre limité de forces dont la combinaison va mener, ou non, à la formation d'un spray de gouttelettes. On peut ainsi relever :

Les forces d'inertie ou forces aérodynamiques, caractérisant la quantité de mouvement des 2 phases en présence, $\rho_k u_k$, avec ρ_k et u_k la masse volumique et la vitesse respectivement de la phase k .

Les forces de tension de surface qui résultent de l'expression à une échelle macroscopique des forces intermoléculaires intervenant aux niveaux de l'interface liquide/gaz. Cette force a plutôt tendance à s'opposer à la précédente et donne à la phase liquide une certaine « résistance » au phénomène de rupture.

La **viscosité** peut également jouer un rôle au sein du processus d'atomisation, dans la mesure où elle rend compte de la dissipation de l'énergie cinétique. Et ce aussi bien dans le liquide que dans le gaz.

1.3.1 Nombres adimensionnels

La comparaison, d'une manière globale ou locale, des différentes forces agissant sur le jet permet ainsi rendre compte de la contribution relative de celles-ci dans le processus de rupture d'un jet liquide en gouttelettes. Et, en outre, de mettre en lumière différents régimes de fractionnement d'un jet liquide tel que l'on peut les observer expérimentalement. C'est pourquoi il est intéressant de définir les nombres sans dimensions suivant, largement utilisés dans le cadre de l'atomisation liquide/gaz.

Le nombre de Reynolds, Re : Ce nombre est défini de façon classique dans tous les types d'écoulements fluides. Il caractérise le rapport entre les forces d'inertie et les forces visqueuses :

$$Re = \frac{\text{Forces d'inertie}}{\text{Forces visqueuses}} . \quad (1.2)$$

De façon générale son expression est :

$$Re = \frac{UL}{\nu} , \quad (1.3)$$

où U et L correspondent respectivement à une vitesse et une longueur caractéristique de l'écoulement. ν est une viscosité cinématique caractéristique.

Concernant les écoulements liquide/gaz et plus spécifiquement l'atomisation, il est possible de définir plusieurs nombres de Reynolds selon ce que l'on cherche à caractériser. Ainsi, on peut définir un nombre de Reynolds « gazeux » pour une goutte comme :

$$Re_g = \frac{|U_l - U_g|D_g}{\nu_g} , \quad (1.4)$$

où U_l et U_g sont les vitesses du liquide et du gaz² respectivement et ν_g la viscosité cinématique de ce dernier. D_g est pris comme étant le diamètre de la goutte. Re_g , tel qu'il est défini ici, indique le rapport entre les forces d'inertie exercées par le gaz environnant sur la goutte et les forces de viscosité de celui-ci. Il est également possible de définir un nombre de Reynolds « liquide » uniquement, celui-ci s'exprime :

2. Il est à noter que dans la suite du document les indices « l » et « g » feront systématiquement référence au liquide et au gaz, respectivement.

$$Re_l = \frac{U_d D_0}{\nu_l} , \quad (1.5)$$

avec, U_d la vitesse débitante du jet et D_0 le diamètre d'injection. Celui-ci rejoint le nombre de Reynolds que l'on définit de manière classique dans le cadre des écoulements monophasiques, pour les jet gazeux par exemple.

Enfin dans le cadre des impacts binaires de goutte on voit également apparaître un nombre de Reynolds collisionnel, indiquant le rapport des forces d'inertie mises en jeu lors de l'impact de 2 gouttes (numérotées 1 et 2) avec les forces dissipées par les gouttes lors de la collision :

$$Re_c = \frac{|U_{l,2} - U_{l,1}| D_g}{\nu_l} . \quad (1.6)$$

Le nombre de Weber, We : Ce nombre permet de caractériser le rapport entre les forces d'inertie et les forces de tension de surface, qualitativement il s'exprime donc :

$$We = \frac{\text{Forces d'inertie}}{\text{Forces de tension de surface}} . \quad (1.7)$$

De façon générale son expression de base est :

$$We = \frac{\rho U^2 L}{\sigma} , \quad (1.8)$$

où σ est le coefficient de tension de surface liquide/gaz.

À l'instar du nombre de Reynolds, il est possible de définir plusieurs nombres de Weber. Ainsi on définit un nombre de Weber « gazeux » rendant compte de la capacité d'une goutte à résister, grâce à la tension de surface, aux forces aérodynamiques du gaz environnant, son expression est :

$$We_g = \frac{\rho_g (U_l - U_g)^2 D_g}{\sigma} . \quad (1.9)$$

De la même manière que pour le nombre de Reynolds, il est également possible de définir un Weber collisionnel, caractérisant cette fois la résistance de gouttes (numérotées 1 et 2), de par leur tension de surface, face aux forces aérodynamiques mises en jeu lors d'un impact binaire, on l'exprime de la manière suivante :

$$We_c = \frac{\rho_l (U_{l,1} - U_{l,2})^2 S_{coll}^{1/2}}{\sigma} , \quad (1.10)$$

ici S_{coll} est la surface de contact lors de l'impact des gouttes.

Finalement, on peut également définir un Weber « liquide », plus globale, pour le jet d'atomisation en utilisant la vitesse débitante U_d et le diamètre d'injection D_0 :

$$We_l = \frac{\rho_l U_d^2 D_0}{\sigma} . \quad (1.11)$$

Le nombre d'Ohnesorge, Oh : Ce nombre sans dimension est une combinaison entre les 2 derniers, il s'exprime de la manière suivante :

$$Oh = \frac{\sqrt{We}}{Re} . \quad (1.12)$$

Il caractérise le rapport entre les forces de viscosités par rapport aux forces aérodynamiques et de tension de surface :

$$Oh = \frac{\text{Forces visqueuses liquides}}{(\text{Forces d'inertie})^{1/2} (\text{Forces de tension de surface})^{1/2}} . \quad (1.13)$$

Il est utilisé, comme on le verra dans la section suivante, pour tracer les différents régimes de fractionnement d'un jet liquide sur un diagramme (Oh, Re) ou encore (Oh, We) .

1.3.2 Théorie linéaire temporelle appliquée au fractionnement d'un jet liquide

Rayleigh [102] fût l'un des premiers à étudier les jets ronds. Il est également l'un des premiers à utiliser la théorie linéaire des instabilités appliquée au fractionnement d'un jet liquide cylindrique.

Cette analyse consiste à considérer un déplacement infinitésimal, η , de l'interface liquide/gaz d'un cylindre axisymétrique de longueur infinie et de rayon stable a comme cela est schématisé sur la figure 1.10. Comme hypothèse de départ, η est choisie comme ayant la forme suivante :

$$\eta = \eta_0 e^{\omega t + i k z} , \quad (1.14)$$

où η_0 est l'amplitude de la perturbation initiale, $k = 2\pi/\lambda$ le nombre d'onde associé à la longueur d'onde λ , z la distance axiale à l'injecteur et t le temps. On cherche alors une équation de dispersion pour le complexe $\omega = \omega_r + i\omega_c$ qui est associé à la variable temporelle t (c'est d'ailleurs pourquoi l'on parle d'étude de stabilité temporelle), ω_r est alors le taux de croissance de la perturbation et ω_c est sa vitesse de propagation, souvent notée c .

Basé sur un bilan énergétique, Rayleigh [102] trouve une équation de dispersion pour le cas d'un jet liquide cylindrique. Cette étude initiale à été quelque peu étendue en utilisant l'hypothèse des petites perturbations notamment par Plateau [99], Weber [139], ou encore Sterling *et al* [123] et Reitz *et al* [106] qui incluent les effets aérodynamiques et de viscosité. Partant de l'hypothèse des petites perturbations, il est possible de linéariser les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement et en tenant compte des conditions cinématiques à l'interface ainsi que de la loi de Laplace, on peut arriver à trouver l'équation de dispersion suivante pour le taux de croissance ω :

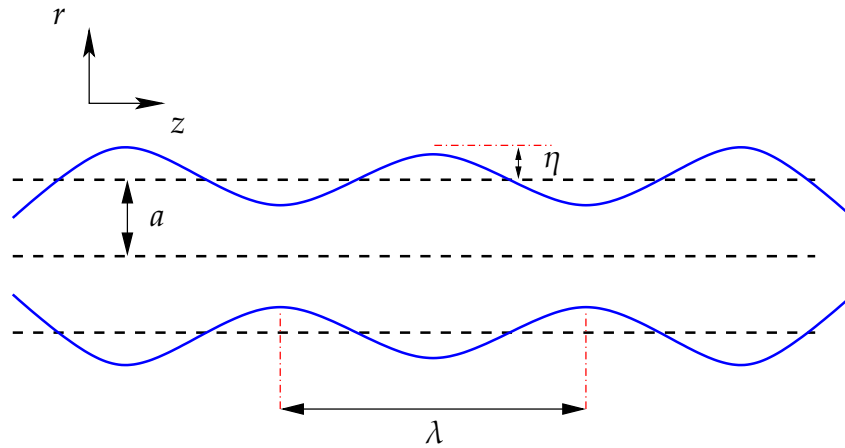


FIGURE 1.10 – Schématisation du jet liquide cylindrique utilisé pour l'analyse de stabilité temporel.

$$\begin{aligned} \omega^2 &+ \frac{2\nu_l k^2 \omega}{I_0(ka)} \left(I_1'(ka) - \frac{2kl}{k^2 + l^2} \frac{I_1'(la)}{I_1(la)} I_1(ka) \right) \\ &= \frac{\sigma k}{a^2 \rho_l} (1 - a^2 k^2) \frac{l^2 - k^2}{l^2 + k^2} \frac{I_1(ka)}{I_0(ka)} + \frac{\rho_g}{\rho_l} \left(u_l(r) - \frac{i\omega}{k} \right)^2 k^2 \frac{l^2 - k^2}{l^2 + k^2} \frac{I_1(ka)}{I_0(ka)} \frac{K_0(ka)}{K_1(ka)}, \quad (1.15) \end{aligned}$$

où $l = (k^2 + \omega/\nu_l)^{1/2}$. I_n sont des fonctions de Bessel modifiées de première espèce, d'ordre n et K_n de seconde espèce, toujours à l'ordre n .

L'étude des limites asymptotiques de cette équation de dispersion va nous permettre de mettre en lumière différents régimes d'atomisation, détaillés dans la section suivante, ainsi que les principaux phénomènes physiques intervenants.

1.3.3 Régimes de fractionnement d'un jet liquide

Une des approches fréquemment utilisée pour catégoriser les régimes de désintégration d'un jet liquide consiste à tracer la courbe de la longueur du cœur liquide, L_{BU} (pour *breakup*) en fonction de la vitesse d'injection U_{inj} . Ce tracé est appelé « diagramme de stabilité » du jet. L_{BU} correspond à la longueur intacte de jet attaché de façon continue au nez de l'injecteur et U_{inj} est souvent prise comme la vitesse débitante du jet, U_d (donnée par le rapport du débit de l'injecteur par la section de ce dernier).

Beaucoup d'auteurs ont obtenu ces courbes dans différentes conditions, on s'appuiera, pour illustrer nos propos, sur les résultats obtenus par Leroux *et al* [73, 74] dans le cas de jets ronds, visibles sur la figure 1.11.

Reitz [104] dans sa thèse, puis Reitz *et al* [106], qui ont mené des expériences similaires, identifient 4 régimes de fractionnement que l'on détaille brièvement :

Le régime de Rayleigh : Il correspond à la région autour du point B dans le diagramme de stabilité (figure 1.11), où l'on peut observer que la longueur de rupture,

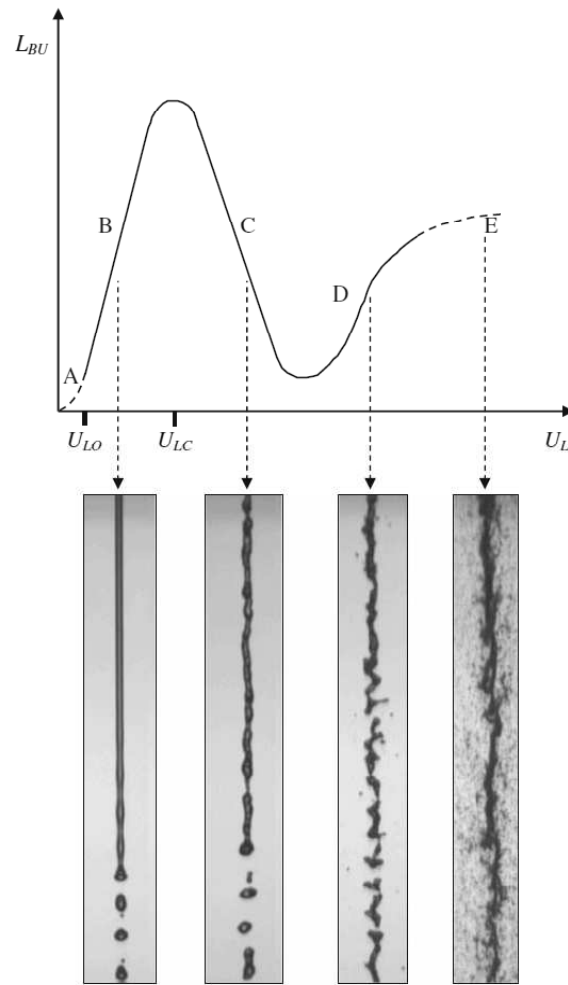


FIGURE 1.11 – Diagramme de stabilité d'un jet rond cylindrique obtenu par Leroux *et al* [73, 74] avec les visualisations relatives aux différents régimes de fractionnement : Rayleigh (région B), « first wind induced » (région C), « second wind induced » (région D) et le régime d'atomisation (région E).

L_{BU} , augmente linéairement avec la vitesse d'injection, U_{inj} . Par ailleurs, Rayleigh [102] montre que dans ce régime le temps de rupture est indépendant de la vitesse d'injection.

Dans ce régime, la force de tension de surface joue un grand rôle, une perturbation axisymétrique est amplifiée par les effets capillaires et provoque la rupture du jet en gouttes dont le diamètre est légèrement supérieur à celui du jet. Ceci étant dû au fait que la longueur d'onde de cette perturbation est elle même supérieure au diamètre initial. Dans cette zone du diagramme, l'augmentation de la vitesse d'injection, U_{inj} , a pour effet d'augmenter la vitesse de transport de cette perturbation mais n'influe pas sur son taux de croissance, si bien que dans ce régime la longueur de rupture augmente avec la vitesse.

Rayleigh [102] propose l'équation de dispersion suivante pour ce régime qui est la réduction de la relation 1.15 :

$$\omega^2 = \frac{\sigma k}{a^2 \rho_l} (1 - a^2 k^2) \frac{I_1(ka)}{I_2(ka)} . \quad (1.16)$$

La résolution de cette équation montre que si $ka > 1$, il y a simple propagation de l'onde initiale et si $ka = 1$, on ne note aucune évolution de la perturbation, car alors $\eta = \eta_0$. Cependant, si $ka < 1$ l'onde ne se propage pas mais la surface du liquide est instable. Cela signifie que toute perturbation dont la longueur d'onde, λ , est supérieure au diamètre du jet est amplifiée. L'équation 1.16 montre que c'est un effet de la tension de surface.

On peut trouver les caractéristiques, λ_{max} et ω_r^{max} , de l'onde dominante à partir du diagramme de stabilité (ω, k) :

$$\lambda_{max} \simeq 9.51a , \quad (1.17)$$

$$\omega_r^{max} \simeq 0.343 \sqrt{\frac{\sigma}{\rho_l a^3}} . \quad (1.18)$$

En supposant qu'une goutte se détache par longueur d'onde, λ_{max} , lorsque $\eta = a$, un bilan massique permet d'exprimer le rayon, r_d , de la goutte :

$$\pi a^2 \lambda_{max} = \frac{4}{3} \pi r_d^3 \text{ soit } r_d \simeq 1.89a . \quad (1.19)$$

On retrouve bien le fait que les gouttes qui se détachent ont un rayon supérieur au rayon initial du jet. Enfin pour déterminer la longueur de rupture, L_{BU} , il est possible d'appliquer la théorie linéaire des perturbations à un jet liquide se déplaçant à la vitesse U_{inj} , la perturbation s'écrit alors : $\eta = \eta_0 e^{ik(z - U_{inj}t)} e^{-\omega t}$. Cette dernière relation permet alors de trouver l'expression de L_{BU} , en effet on obtient $\omega t_r = C_1$ avec $t_r = L_{BU}/U_{inj}$ le temps de séjour avant collision et $C_1 = \ln(\eta_r/\eta_0)$, η_r étant défini comme l'écart à la configuration stable à la rupture. En considérant la relation 1.18 à la rupture, on obtient la relation suivante :

$$L_{BU} = \frac{C_1}{0.343} a \sqrt{\frac{\rho_l U_{inj}^2 a}{\sigma}} , \quad (1.20)$$

ainsi L_{BU} est proportionnelle à U_{inj} ce qui est confirmé par les expériences à faibles vitesses pour ce régime (c.f. figure 1.11).

First wind induced breakup : Dans ce régime, que l'on pourrait traduire par « premier régime induit par l'aérodynamique », la longueur de rupture diminue avec la vitesse d'injection (région C sur le diagramme, figure 1.11). Cette transition est souvent attribuée à l'apparition d'instabilités de cisaillement, de type Kelvin-Helmoltz, provoquées par les forces aérodynamiques, jusque là négligeables dans le régime précédent. En outre, le taux de croissance de ces perturbations augmente lorsque la vitesse du jet augmente, expliquant le fait que la longueur de rupture diminue avec la vitesse débitante dans ce cas. Qualitativement, l'étude de l'image qui correspond

à ce régime, figure 1.11, montre que la colonne liquide est perturbée sur toute sa longueur par des instabilités non symétriques, caractéristiques du cisaillement. Les gouttes formées ont un rayon plus perturbé que pour le régime de Rayleigh, cependant celui-ci reste du même ordre de grandeur.

Concernant l'analyse de stabilité, le second terme du membre de droite de l'équation 1.15 contenant les effets aérodynamiques ne peut plus être négligé. Weber [139] propose l'équation de dispersion suivante :

$$\omega^2 - 3\nu_l k^2 \omega = \frac{\sigma}{2a^3 \rho_l} (1 - a^2 k^2) + \frac{\rho_g}{\rho_l} \frac{u_l^2 k^3 a^3}{2a^2} \frac{K_0(ka)}{K_1(ka)} . \quad (1.21)$$

Le taux d'accroissement des perturbations est cette fois influencé par la présence du gaz environnant et directement par la vitesse u_l . La rupture du jet intervient plus tôt que pour le régime précédent. Par ailleurs on peut montrer que le rayon des gouttes formées reste sensiblement de l'ordre du diamètre du jet. La tension de surface intervient toujours, et dans ce régime pour les grandes longueurs d'onde de perturbation ($ka \ll 1$), celle-ci favorise la rupture de la colonne liquide.

Second wind induced breakup : Ce régime correspond au « second régime induit par l'aérodynamique », on remarque que la longueur de rupture réaugmente légèrement avec la vitesse d'injection (région D, figure 1.11). Il semble que dans ce régime les effets aérodynamiques prennent un rôle prépondérant, la vitesse de glissement entre les phases augmentant encore. Une augmentation de la turbulence dans le jet liquide apparaît, ceci étant imputable, une fois de plus, à l'augmentation de la vitesse. Si bien que la colonne liquide est très instable (comme on peut l'observer sur l'image correspondant à ce régime, figure 1.11), la surface liquide n'est plus régulière et il est possible d'observer l'apparition de gouttes dont les diamètres sont nettement inférieurs aux 2 régimes précédents, et qui se forment dès la sortie de l'injecteur.

En négligeant, cette fois, les effets visqueux l'équation 1.15 peut se réécrire :

$$\omega^2 = \frac{\rho_g u_l^2 k^2 - \sigma k^3}{\rho_l} , \quad (1.22)$$

considérant que la vitesse d'injection impose des longueurs d'onde de perturbations de plus en plus faibles. Cette équation de dispersion indique que $\omega = \omega_r$ lorsque $\rho_g u_l^2 k^2 > \sigma k^3$, ce qui signifie que la tension de surface s'oppose, dans ce cas, au fractionnement du jet, contrairement aux régimes précédents.

Le régime d'atomisation : Ce régime, en région E sur la figure 1.11, est caractérisé par la création d'un brouillard de fines gouttelettes. De fortes instabilités se développent dès la sortie de l'injecteur. On peut définir ce régime comme étant celui dans lequel les perturbations au nez de l'injecteur mènent à l'arrachement de gouttes dont les diamètres moyens sont bien inférieurs au diamètre du jet D_0 (Lefebvre [70]). La dernière photo correspondante sur la figure 1.11 montre clairement que ce régime est turbulent et des gouttes de très petite taille sont présentes tout au long de la colonne liquide, très fortement perturbée pour sa part.

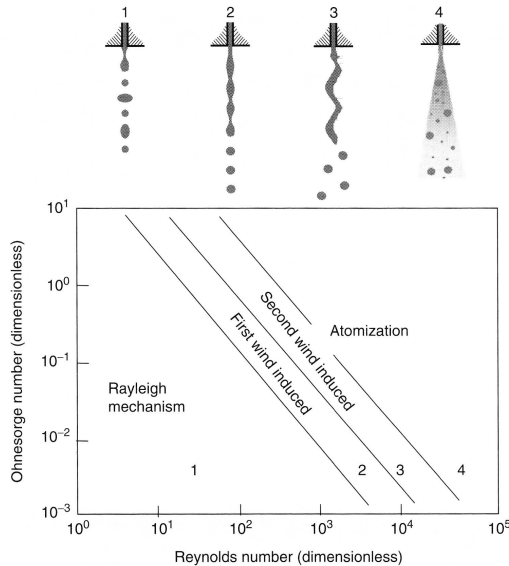
En remplaçant dans l'équation 1.15 les fonctions de Bessel par leurs valeurs asymptotiques quand $ka \rightarrow \infty$ (diamètres des gouttes très inférieurs à celui du jet) on peut trouver l'équation de dispersion suivante :

$$(\omega^2 + 2\nu_l k^2)^2 + \frac{\sigma k^3}{\rho_l} - 4\nu_l k^3 \left(k^2 + \frac{\omega}{\nu_l} \right)^{1/2} + (\omega + i\nu_l k)^2 \frac{\rho_g}{\rho_l} = 0 . \quad (1.23)$$

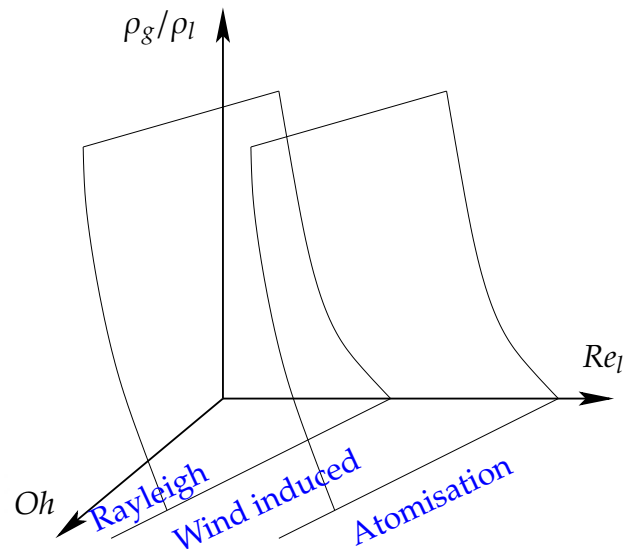
Cette fois on peut voir que le taux d'accroissement des perturbations est indépendant du diamètre d'injection et ne dépend plus que de la viscosité du liquide, des masses volumiques des 2 phases ainsi que de la vitesse du liquide. Néanmoins, il faut rester prudent vis-à-vis de la linéarisation des équations dans ce régime, à cause des profils de vitesse et de la turbulence. L'utilisation de la théorie linéaire se révèle être discutable ici.

1.3.4 Classification des régimes de fractionnement

Pour des conditions stationnaires, il est ainsi possible de classer les différents régimes, mis en lumière dans la section précédente, dans des diagrammes (Oh, We) ou encore (Oh, Re). Ceci a été proposé par plusieurs auteurs tels Faeth [30] ou encore Reitz [104]. Ainsi, la figure 1.12(a) présente un diagramme (Oh, Re_l) représentant les différentes limites entre les régimes d'atomisation. Reitz [104] propose les limites qualitatives sur la figure 1.12(b) prenant en compte le rapport des masses volumiques, ρ_l/ρ_g , dans une troisième dimension.



(a) Diagramme d'Ohnesorge.



(b) Limites qualitatives proposées par Reitz [104], incluant l'effet des masses volumiques.

FIGURE 1.12 – Classification des régimes d'atomisation.

Même si la transition entre les régimes « *second wind induced* » et d'atomisation est parfois difficile à discerner expérimentalement, il est clair que du point de vue des hauts nombre Weber et haut Reynolds, les sprays générés au sein des moteurs diesel, se situent dans le régime d'atomisation sur les différents diagrammes tracés.

1.3.5 Paramètres influençant l'atomisation primaire

Dans cette section, en s'appuyant toujours sur des observations expérimentales, on s'intéresse aux différents phénomènes qui jouent, d'une manière ou d'une autre, sur l'atomisation primaire pour des jets hautes pressions cylindriques. On rappelle que l'atomisation primaire est relative à la désintégration de la structure cohérente de liquide sortant de l'injecteur, et qui mène à la formation des premiers ligaments et des premières gouttes.

Ainsi, dans son livre Baumgarten [5] propose un schéma, figure 1.13, qui résume les différents mécanismes qui peuvent être à l'origine de l'atomisation primaire pour des injections hautes pressions.

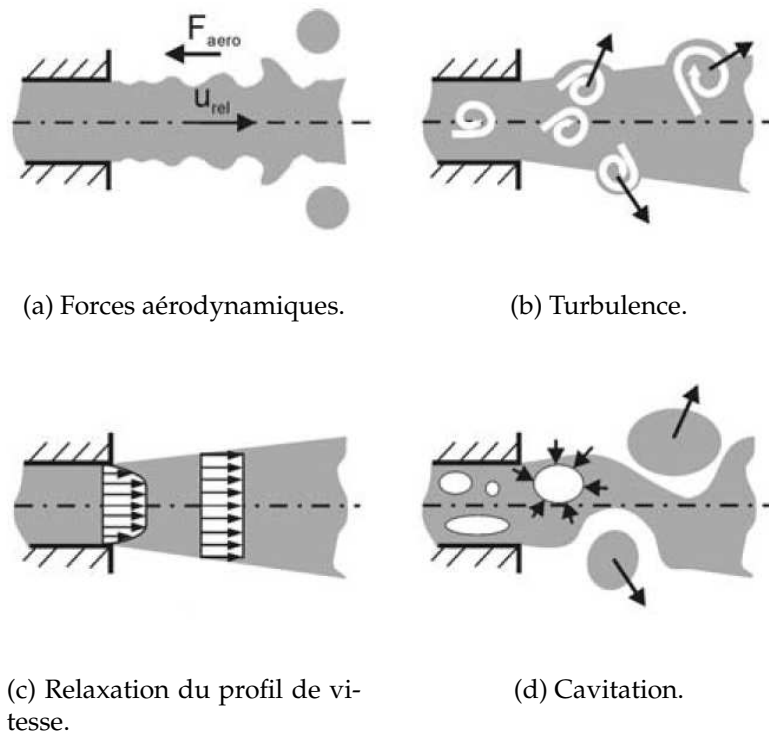


FIGURE 1.13 – Schématisation des différents processus pouvant mener à l'atomisation primaire d'après Baumgarten [5].

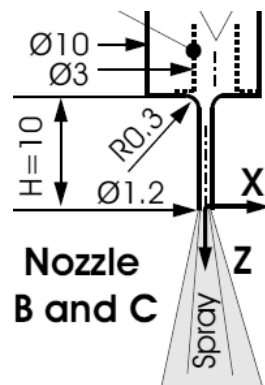
Instabilités dues aux forces aérodynamiques : La vitesse relative entre la phase liquide et gazeuse est très importante (c.f. figure 1.13(a)). Si bien que le cisaillement est important à l'interface liquide/gaz. La turbulence générée au sein de l'injecteur

va créer des perturbations à la surface du jet qui pourront être amplifiées par ces effets aérodynamiques. Certaines perturbations peuvent être instables et contribuent à arracher les premières structures à la colonne liquide, à savoir des filaments et des gouttes.

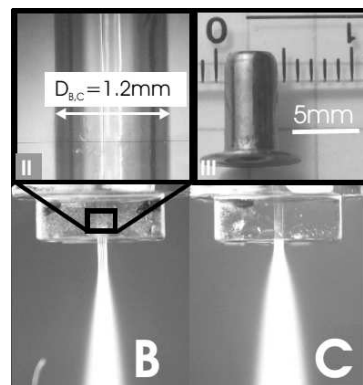
Néanmoins, ces forces aérodynamiques n'interviennent qu'à la surface du jet et n'impactent que peu le cœur de celui-ci. Ils n'expliquent surement qu'en partie le phénomène d'atomisation primaire.

Le phénomène de turbulence : Un second phénomène influençant l'atomisation primaire est la turbulence présente au sein même du jet qui peut être générée par l'écoulement dans l'injecteur, ce qui est schématisé figure 1.13(b). Si des fluctuations turbulentes de vitesse dans la direction radiale sont présentes, alors il est possible que celles-ci soient suffisamment fortes pour vaincre les forces de tension de surface. Ce point a été, par exemple, discuté et mis en lumière par Wu *et al* [141] sur un cas où les effets aérodynamiques sont faibles. L'atomisation induite par la turbulence est, en fait, considérée comme un des mécanismes le plus important pour les injections hautes pressions.

On peut en voir un exemple sur la figure 1.14(b), issu des travaux de Stahl *et al* [121], où l'on voit que l'ajout d'un insert dans la buse d'injection, modifiant l'écoulement interne et donc le niveau de turbulence, modifie la topologie du spray en sortie. Pour le cas C (avec insert), où la turbulence est plus forte, la longueur du jet de rupture décroît et l'angle de spray augmente par rapport au cas B (sans insert).



(a) Schéma de l'injecteur, position de l'obstacle : point noir.



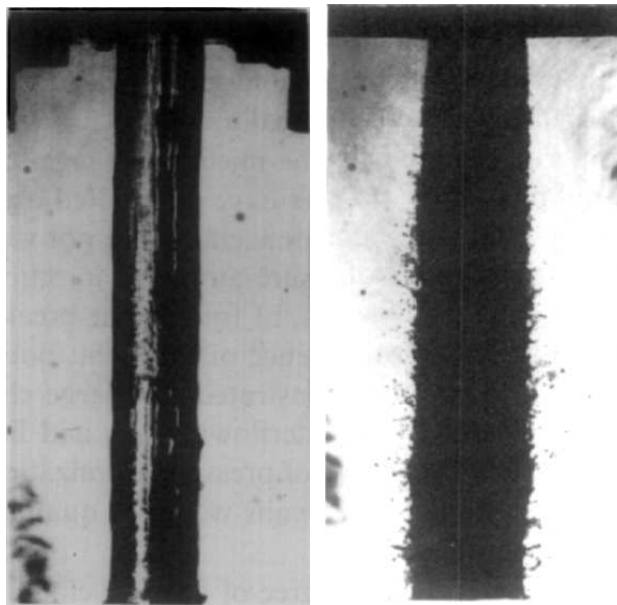
(b) Résultats sans obstacle (cas B) et avec (cas C).

FIGURE 1.14 – Visualisations de résultats obtenus par Stahl *et al* [121], $Re_{B,C} = 6700$ et $Oh = 0.21$. La présence d'un obstacle au sein de l'injecteur (visible au dessus du cas C) influe sur le niveau de turbulence et ainsi sur la topologie du spray en sortie.

Relaxation du profil de vitesse : Un autre mécanisme pouvant influencer l'atomisation, peut être la relaxation du profil de vitesse en sortie d'injecteur. Dans le cas de

turbulence pleinement développée dans l'injecteur (cas de grand rapport L_{inj}/D_0 entre la longueur de l'injecteur et le diamètre de sortie), il est possible que le profil de vitesse change brusquement à la sortie de la buse d'injection (c.f. figure 1.13(c)). Ceci étant dû au fait qu'il n'y a plus de conditions limites de parois, les forces visqueuses dans le jet liquide peuvent alors changer de façon abrupte le profil de vitesse en provoquant des instabilités.

Faeth *et al* [31] ont montré que le rapport L_{inj}/D_0 jouait effectivement un rôle important sur la topologie du spray pour de forts nombres de Reynolds, ce que l'on peut observer sur les figures 1.15(a) et (b) où ce rapport vaut 4 et 10 respectivement.



(a) $L_{inj}/D_0 = 4$.

(b) $L_{inj}/D_0 = 10$.

FIGURE 1.15 – Influence du rapport L_{inj}/D_0 sur la topologie du spray, résultats de Faeth *et al* [31].

Il est à noter que pour des nombres de Weber et de Reynolds moins élevés, McCarthy *et al* [89] ont également relevé une importance notable du rapport L_{inj}/D_0 , cela est observable sur les visualisations issues de leurs expérimentations, figure 1.16.

Le phénomène de cavitation : Un dernier mécanisme jouant grandement sur l'atomisation primaire est le phénomène de cavitation, figure 1.13(d). Il peut arriver, localement au sein de la buse d'injection, que la pression devienne inférieure à la pression de vapeur saturante. Il en résulte la formation de poches de carburant vapeur, c'est le phénomène de cavitation. L'intensité ainsi que la topologie des structures de cavitation dépendent surtout de la géométrie de l'injecteur ainsi que des conditions limites de pression. L'écoulement à l'intérieur de l'injecteur est alors diphasique. Ceci modifiant, d'une part, l'écoulement dans la buse d'injection et peut augmenter la turbulence. D'autre part, des bulles de vapeur peuvent émerger du nez de ce dernier, et éventuellement

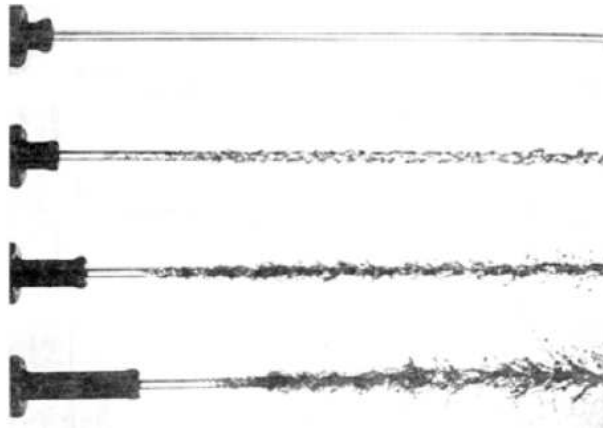


FIGURE 1.16 – Influence du rapport L_{inj}/D_0 sur la longueur de rupture, L_{BU} , d'un jet liquide glicérol/eau dans l'air. D'après McCarthy *et al* [89], de haut en bas : $L_{inj}/D_0 = 0; 1; 5$ et 10 pour une vitesse d'injection constante de $20m.s^{-1}$.

exploser sous l'effet du différentiel de pression entre celles-ci et le gaz ambiant dans la chambre de combustion.

Beaucoup d'études ont été consacrées à ce phénomène, Reitz *et al* [106] par exemple mettent en évidence que la présence de cavitation a comme conséquence d'augmenter l'angle de spray et diminuer la longueur de pénétration L_{BU} . Plus récemment, Saliba *et al* [110] mettent en évidence l'apparition de poches de cavitation dans des conditions proches de l'injection de type Diesel, ce que l'on peut observer sur la figure 1.17. Les auteurs montrent également que la géométrie de l'injecteur influe de façon significative sur ce phénomène et qu'il est même possible de s'en affranchir sous certaines conditions.

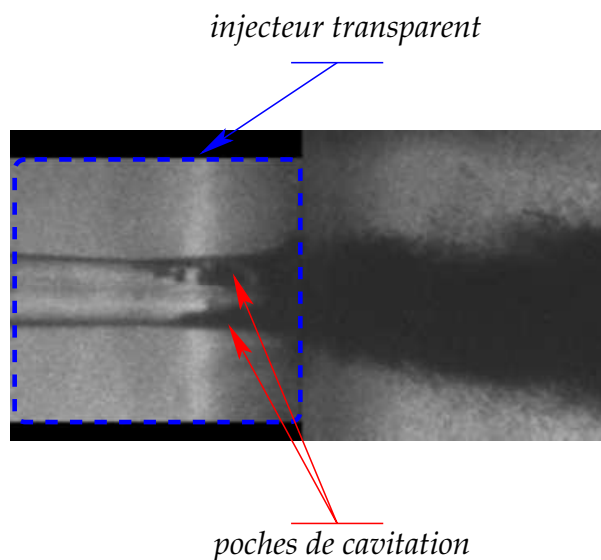


FIGURE 1.17 – Visualisation du phénomène de cavitation dans un injecteur transparent, résultats de Saliba *et al* [110].

1.4 Conclusions sur l'étude expérimentale du phénomène physique

A ce point, il est possible de faire un bilan intermédiaire car le contexte est clair. L'injection, telle qu'elle est conçue dans les moteurs Diesel, est clairement située dans le régime d'atomisation avec des vitesses d'injection et des pressions élevées. Plus exactement, cela signifie que ces écoulements possèdent intrinsèquement de forts nombres de Reynolds et Weber, qui caractérisent de façon globale celui-ci. Dans ce régime le spray est caractérisé par la présence de gouttes de très petites dimensions et surtout un cœur liquide constituant la zone d'atomisation primaire en proche sortie d'injecteur dont les premières structures liquides sont issues.

Ce chapitre nous a permis de montrer que de nombreux phénomènes jouent sur l'atomisation primaire et le développement d'instabilités. De manière non exhaustive on peut ainsi relever le niveau de turbulence, le phénomène de cavitation la géométrie de l'injecteur ou encore les instabilités de surface. Or, même si l'on arrive à comprendre globalement les phénomènes physiques influençant l'atomisation primaire, il reste difficile d'atteindre le détail de l'écoulement surtout en zone dense, en proche sortie d'injecteur de manière expérimentale. D'une part parce, que ces phénomènes sont fortement intriqués (et difficilement dissociables) et font apparaître une grande variété d'échelles spatiales et temporelles. D'autre part, d'un point de vue plus pratique, cette zone reste difficilement accessible expérimentalement, même si de récentes approches semblent prometteuses. Ainsi il reste de nombreuses zones d'ombre et de questions ouvertes quant à l'influence de la présence de cette zone dense et les mécanismes à l'œuvre sur la topologie globale du spray.

Chapitre 2

Revue des modèles d'atomisation

L'ÉTUDE de l'atomisation par la simulation numérique s'impose de plus en plus, pour ce type d'écoulement, comme un complément aux études expérimentales. En effet, celle-ci peut permettre, d'une part, de comprendre plus finement les phénomènes physiques à l'œuvre dans l'écoulement liquide/gaz qui nous intéresse, et d'autre part, de caractériser l'impact de la zone primaire d'atomisation sur l'ensemble du spray. Par exemple, on arrive à reproduire la répartition spatiale des gouttes, la pénétration du liquide, l'angle de spray ou encore la distribution en taille des gouttes. Ce chapitre montrera l'intérêt de l'outil numérique pour la simulation de ces écoulements complexes et replacera notre étude dans l'éventail des modélisations préexistantes.

2.1 L'approche numérique

De manière générale, on distingue trois grandes familles de simulation numérique des écoulements fluides. À savoir la simulation numérique directe, ou DNS (pour *Direct Numerical Simulation*) qui prend le parti de résoudre toutes les échelles de l'écoulement, la modélisation RANS (pour *Reynolds Average Navier-Stokes*) basée sur la décomposition en moyenne de Reynolds des champs hydrodynamiques et enfin, apparue plus récemment, la simulation aux grandes échelles, ou LES (*Large Eddy Simulation*) où seules les grandes échelles de la turbulence sont effectivement calculées, considérant l'aspect universel de la turbulence aux petites échelles.

Néanmoins, ces méthodes quand elles sont appliquées à l'atomisation se heurtent à des difficultés spécifiques. C'est le cas, par exemple, de la prise en compte de la zone dense en simulation numérique qui pose encore des problèmes. Cette section reviendra de façon succincte sur la simulation numérique d'écoulement fluide, ou CFD (pour *Computational fluid dynamics*) et les idées de bases sur lesquels se fondent les différents formalismes DNS, RANS et LES. Ensuite, nous considérerons la prise en compte d'un écoulement liquide/gaz en atomisation dans ce contexte.

2.1.1 L'outil numérique pour la simulation d'écoulements fluides

En CFD on cherche à résoudre, en espace et en temps, le jeu d'équations aux dérivées partielles permettant de décrire la dynamique d'un écoulement particulier.

Ce jeu d'équations est basé, la plupart du temps, sur des bilans rendant compte de la conservation de grandeurs, telles la masse, la quantité de mouvement ou encore l'énergie. L'ensemble de ces relations constitue les équations de Navier-Stokes [95] pour les écoulements fluides.

Par exemple, dans le cas d'écoulements monophasiques, incompressibles et isothermes ce système se réduit alors à l'équation de bilan de masse¹ :

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad , \quad (2.1)$$

et l'équation de conservation de quantité de mouvement, qui s'exprime dans la direction $i, \{i = 1, 2, 3\}$:

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right) \quad , \quad (2.2)$$

où u_i est la vitesse fluide dans la direction i , P la pression, μ est la viscosité dynamique et ρ la masse volumique. Tout l'art de la CFD consiste alors à trouver une solution numérique pour les variables hydrodynamiques (ici P et u) satisfaisant au système constitué des équations de Navier-Stokes afin d'obtenir une résolution temporelle et spatiale de l'écoulement que l'on cherche à simuler.

Dans le cas d'écoulements plus complexes, le système initial présenté dans notre exemple est susceptible d'être modifié et peut également se voir adjoindre des équations de transport supplémentaires. C'est le cas, par exemple, si l'on est en présence d'un écoulement réactif où il faut prendre en compte les réactions chimiques, le dégagement de chaleur ou encore le transport des espèces. C'est également le cas, on le verra, si l'on considère un écoulement liquide/gaz.

Les codes CFD sont structurés autour d'algorithmes numériques conçus pour résoudre le problème posé par les équations de Navier-Stokes, alors que l'outil informatique est utilisé pour effectuer l'importante quantité de calcul nécessaire. Ainsi, il existe tout un panel d'algorithmes et de méthodes de résolution pour la plupart basées sur la discrétisation des opérateurs de dérivation sur un maillage, cartésien par exemple, pour ensuite intégrer les équations de Navier-Stokes tout en tenant compte des conditions initiales et aux limites de l'écoulement. On comprend dès lors que le temps nécessaire à la résolution spatiotemporel de l'écoulement est intimement lié à la puissance calculatoire dont on dispose. En outre, la résolution numérique directe (DNS) des équations de Navier-Stokes pour des écoulements complexes avec de hauts nombres de Reynolds reste encore un défi, et ce malgré les progrès constants de l'informatique. Ceci est principalement dû au phénomène de turbulence auquel sont soumis les écoulements à fort Reynolds.

Il est possible d'illustrer ce fait en se basant sur l'analyse dimensionnelle conduite par Kolmogorov [58]. En effet, si l'on tient à décrire toutes les échelles de la turbulence, alors il faut pouvoir rendre compte des échelles de dissipation de l'énergie cinétique turbulente, que l'on notera l_d . D'un point de vue de la discrétisation, la longueur l_d doit alors être décrite sur un nombre suffisant de points du maillage, n , dont la valeur

1. Précisons que l'on utilisera, la plupart du temps, la notation indicielle d'Einstein dans ce mémoire.

communément admise oscille entre 3 et 5 pour la plupart des méthodes numériques. Si on note l l'échelle intégrale, caractéristique de l'écoulement moyen ou de la géométrie de celui-ci, et en considérant $l \gg l_d$, l'analyse de Kolmogorov donne, $l/l_d \sim Re^{3/4}$, alors ceci implique que le nombre total de points de discrétisation du maillage, N , nécessaires pour résoudre toutes les échelles voulues en 3 dimensions, s'exprime :

$$N = \left(\frac{l}{l_d/n} \right)^3 \sim n^3 Re^{9/4} . \quad (2.3)$$

En conséquence de quoi, augmenter par un facteur 10 le nombre de Reynolds signifie que $N_{Re \times 10} \rightarrow 10^{9/4} N_{Re} \simeq 175 \times N_{Re}$ ce qui tend à rapidement dépasser la taille mémoire des plus gros calculateurs actuels lorsque l'on considère le type d'écoulement rencontré en milieux industriels telle l'atomisation liquide/gaz dans les moteurs. A cela s'ajoute le fait que, plus le nombre de Reynolds augmente, plus la longueur l_d diminue et donc le temps caractéristique de turbulence associé diminue également. Les écoulements instationnaires devant être résolus temporellement, le même type d'analyse que précédemment peut montrer que le temps de simulation est quant à lui proportionnel à $\sim Re^3$ pour la plupart des méthodes numériques.

Une alternative consiste donc à réduire la description physique de l'écoulement et de modéliser les effets des plus petites échelles (spatiales et/ou temporelles) de la turbulence plutôt que de tenter de résoudre celles-ci. C'est donc l'essence des formalismes RANS et LES, le premier étant basé sur une réduction de la complexité par la résolution de la moyenne d'ensemble des équations de Navier-Stokes et le second sur la résolution des équations convoluées spatialement. La résolution du problème demande donc moins de ressources informatiques mais en contrepartie réclame un effort de modélisation important et varié selon le formalisme utilisé.

2.1.2 Réduction de la complexité

On se propose donc dans cette section de rappeler les principes fondamentaux sur lesquels sont basées simulations RANS et LES ainsi que les avantages et inconvénients que l'on peut attendre de ces 2 formalismes, et ce d'une manière très générale. C'est-à-dire sans considérer la problématique d'un écoulement liquide/gaz.

2.1.2.1 Le formalisme RANS

Ce formalisme est basé sur la description statistique « moyenne » d'un écoulement. C'est-à-dire que l'on ne cherche pas à résoudre un écoulement donné, mais plutôt la moyenne d'ensemble d'une infinité d'écoulements semblables. La statistique de cette infinité de « réalisations » (on parle aussi d'« expériences ») permet alors d'obtenir les variables statistiques moyennes de l'écoulement recherché. Ainsi pour une variable hydrodynamique quelconque, A , cette moyenne, $\bar{A}$, est définie sur N réalisations comme :

$$\bar{A}(\vec{x}, t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N A^n(\vec{x}, t) . \quad (2.4)$$

Dans le cas d'écoulements stationnaires on peut alors parler de moyenne temporelle, mais rien n'empêche de considérer des écoulements instationnaires.

Notons qu'il peut être pratique, dans le cas d'écoulement à masse volumique variable, de définir la moyenne de Favre symbolisée par $\overline{(\bullet)}$, de sorte que la vitesse moyenne soit égale à la quantité de mouvement volumique moyenne divisée par la masse volumique moyenne, soit pour la composante dans la direction i :

$$\widetilde{u}_i = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\sum_{n=1}^N \rho^n u_i^n / \sum_{n=1}^N \rho^n \right) = \frac{\overline{\rho u_i}}{\overline{\rho}} . \quad (2.5)$$

En RANS, on résout alors les équations de Navier-Stokes moyennées, c'est-à-dire que l'on cherche à obtenir les variables moyennes, par exemple $\widetilde{u}_i$ et $\overline{P}$ pour le système constitué des équations 2.1 et 2.2 moyennées. Néanmoins, l'opérateur de moyenne appliqué à cette dernière équation fait apparaître un tenseur non fermé, $\overline{\rho R_{ij}} = \overline{\rho u'_i u'_j}$, appelé tenseur de Reynolds. En ignorant les effets visqueux et considérant que l'écoulement est à haut Reynolds on peut réécrire l'équation de bilan de quantité de mouvement :

$$\frac{\partial \overline{\rho u_i}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho u_i u_j}}{\partial x_j} = - \frac{\partial \overline{R_{ij}}}{\partial x_j} - \frac{\partial \overline{P}}{\partial x_i} \quad \text{avec} \quad R_{ij} = \overline{\rho u'_i u'_j} , \quad (2.6)$$

où u'_i est défini comme une fluctuation de vitesse, $u'_i = u_i - \widetilde{u}_i$: c'est l'écart entre la vitesse mesurée dans une réalisation et la vitesse moyenne (sur N réalisations), elle dépend de l'écoulement considéré. Il en va de même pour toutes les autres variables hydrodynamiques. La simple présence du tenseur de Reynolds, R_{ij} , dans l'équation de la quantité de mouvement moyenne montre qu'un écoulement turbulent ne peut pas être caractérisé seulement par ses grandeurs moyennes, telles $\overline{\rho}$ ou encore $\widetilde{u}_i$, si l'on veut prédire son évolution. Il est nécessaire de prendre en compte l'effet des mouvements turbulents aléatoires.

La fermeture du tenseur de Reynolds est donc réalisée grâce à un « modèle de turbulence » qui utilise des grandeurs caractéristiques moyennes de l'écoulement étudié. On peut alors introduire des grandeurs turbulentes. On parle ainsi de vitesses, longueurs, temps et viscosités turbulentes. Un des modèles les plus usités est celui appelé k - ε , issu des travaux de Launder *et al* [63], qui utilise 2 équations de transport supplémentaires afin de fermer les équations du mouvement moyen. Une pour l'énergie cinétique turbulente massique $\widetilde{k}$ et une pour le taux de dissipation de cette énergie notée $\widetilde{\varepsilon}$. La suite va nous permettre de développer quelque peu ce modèle (c.f. section 2.2.2.5). On ne détaillera donc pas les équations ici, mais il convient de retenir que celui-ci permet de définir un temps turbulent, $\tau_t = \widetilde{k} / \widetilde{\varepsilon}$, une longueur turbulente, $l_t = \widetilde{k}^{3/2} / \widetilde{\varepsilon}$ et un coefficient de viscosité turbulent, $\mu_t = C_\mu \overline{\rho} \widetilde{k}^2 / \widetilde{\varepsilon}$. Ainsi, le modèle postule qu'une seule longueur est suffisante pour représenter toute la complexité de la turbulence.

Au final, le formalisme RANS présente comme avantage de considérablement réduire la demande en ressource informatique par rapport à la DNS ou encore la LES, ce qui signifie qu'il peut être utilisé dans des applications beaucoup plus complexes que ces derniers, en terme de géométrie et aussi avec des nombres de Reynolds beaucoup plus élevés pour un temps de calcul inférieur. Dans le cas d'un écoulement

stationnaire en moyenne, une simulation RANS peut également atteindre la solution convergée beaucoup plus rapidement. On comprend dès lors pourquoi ce formalisme a été et est toujours beaucoup utilisé dans le milieu industriel.

A contrario, considérant qu'en RANS toute la dynamique des échelles de la turbulence doit être modélisée, il est dur de développer un modèle universel et les paramètres de la simulation doivent souvent être en quelque sorte « réglés » pour tenir compte des particularités de l'écoulement que l'on cherche à simuler. Enfin on peut noter que la plupart du temps, d'un point de vue pratique, plus on cherche à obtenir un modèle de turbulence précis plus le jeu d'équations pilotant l'écoulement peut être « complexe ». Ceci peut être à l'origine d'instabilités numériques ou encore mener à des problèmes de convergence, compte tenu des fortes interactions entre les différentes variables du problème.

2.1.2.2 Le formalisme LES

Dans ce formalisme la réduction de la complexité de l'écoulement est assurée par l'utilisation d'un filtre spatial. On cherche alors à résoudre les fluctuations des grandeurs hydrodynamiques dont les échelles spatiales sont supérieures à une échelle de longueur, $\bar{\Delta}$, dite « tailles du filtre » ou encore « largeur du filtre ». L'opération de filtrage d'une variable quelconque f se définit comme une convolution spatiale par un filtre G de taille caractéristique $\bar{\Delta}$. L'expression de $\bar{f}$, la variable filtrée, est alors² :

$$\bar{f}(x, y, z) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} G(\bar{\Delta}, x - x', y - y', z - z') f(x', y', z') dx' dy' dz' . \quad (2.7)$$

Le filtre, G , a une intégrale valant 1 mais sa valeur devient nulle lorsque l'on s'éloigne nettement du point testé (plus de $1\bar{\Delta}$). Le volume du support du noyau de convolution peut être infini, comme sur la dernière relation, mais peut tout aussi bien être compact. Plus que la forme du noyau de convolution c'est l'échelle spatiale, $\bar{\Delta}$, qui compte, celle-ci indiquant le domaine autour du point (x, y, z) où G a une valeur significative.

De la même manière que l'on avait obtenu l'équation de transport de la quantité de mouvement moyenne en RANS en appliquant l'opérateur de moyenne sur l'équation 2.2, l'application de l'opérateur de filtrage sur cette dernière nous donne l'équation de bilan de quantité de mouvement que l'on cherche à résoudre en LES. Toujours avec ρ et μ constantes, par souci de simplicité :

$$\frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho (\bar{u}_i \bar{u}_j + \tau_{ij})}{\partial x_j} = - \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right) . \quad (2.8)$$

avec le tenseur $\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j$, appelé « tenseur de sous maille », qui, à l'instar de R_{ij} dans la formulation RANS, est non fermé. Le terme $\partial \tau_{ij} / \partial x_j$ doit rendre compte de l'interaction des plus petites échelles de l'écoulement avec celles effectivement résolues (*i.e.* $> \bar{\Delta}$), ce dernier terme doit bien sûr être modélisé. L'intérêt du formalisme LES, par rapport à la RANS, est que seules les fluctuations filtrées doivent être modélisées

2. Ici la notation $\overline{(\bullet)}$ correspond à la convolution par le filtre G comme il est d'usage dans ce formalisme et par conséquent ne désigne plus la moyenne statistique, ce qui était le cas en RANS.

(dont l'échelle caractéristique, l_c , est telle que : $l_c < \bar{\Delta}$). En effet, une grande partie de l'énergie cinétique turbulente est prise en charge par le calcul, si bien que cela évite l'hypothèse forte qu'une seule échelle de longueur suffit pour représenter les caractéristiques spatiales de la turbulence. Même si une seule échelle de longueur est considérée pour modéliser les échelles inférieures à $\bar{\Delta}$ toutes les autres échelles seront résolues.

Ainsi, même en utilisant un modèle similaire au RANS, du type $k-\varepsilon$, pour les plus petites échelles, on s'attend à ce que les résultats soient plus précis que pour le formalisme RANS. Notons ici qu'un des modèles les plus fréquemment utilisé est celui de Smagorinsky [120] qui définit une viscosité, dite de sous maille, ν_{SGS} . La fermeture de τ_{ij} est alors assurée par une loi de type gradient, telle que $\tau_{ij} = \nu_{SGS} \bar{S}_{ij}$ avec $\bar{S}_{ij}$ le tenseur des efforts résolu. C'est donc une fermeture au premier ordre qui a été largement utilisée et validée sur de nombreux cas dans le cadre monophasique. Nous reviendrons sur son expression en détail dans le chapitre suivant.

En plus d'être précis, on s'attend également à ce que les modèles LES soient plus universels et permettent ainsi de résoudre une grande variété d'écoulements. De plus, la résolution des écoulements instationnaires en LES peut permettre d'avoir une résolution temporelle suffisante pour comprendre l'évolution d'un phénomène. En outre, il est possible d'obtenir les *extrema* des grandeurs sur certaines périodes de temps ce qui est particulièrement indiqué dans beaucoup d'applications d'ingénieries. Par exemple, pour les moteurs, on pense ici au phénomène de variations cycle-à-cycle relevées expérimentalement dans les chambres de combustions des moteurs. La simulation LES permet de rendre compte de ce phénomène, comme l'ont montré Vermorel *et al* [131], alors que la modélisation RANS ne le peut pas, celle-ci étant basée sur une moyenne statistique. De plus, dans la mesure où la taille du filtre, $\bar{\Delta}$, est spécifiée, l'effort numérique peut être ajusté pour trouver le meilleur compromis entre précision et coût numérique.

En contrepartie la LES présente un coût numérique plus élevé que le formalisme RANS. Celui-ci reste néanmoins beaucoup moins grand que pour une DNS complète, ce qui permet d'envisager des cas avec de hauts nombres de Reynolds.

2.2 Modèles d'atomisation

Comme on l'a vu précédemment, si l'on souhaite résoudre numériquement un écoulement d'atomisation primaire, 3 choix de formalismes s'offrent à nous. Même si ces formalismes sont bien développés pour les écoulements monophasiques, la présence simultanée de 2 phases avec des masses volumiques très variables est quelque peu problématique.

En DNS, et dans la mesure où l'on cherche à calculer explicitement toutes les échelles spatiales et temporelles, un des problèmes majeur est celui du suivi d'interface. Une revue de la littérature montre que de nombreux efforts ont été réalisés en ce sens, néanmoins il reste le problème du temps de calcul long et des ressources importantes nécessaires afin de simuler l'atomisation primaire, compte tenu des hauts nombres de Weber et de Reynolds dans cette catégorie d'écoulements. Néanmoins, certains calculs

ont déjà été réalisés. Nous montrerons ainsi quelques résultats obtenus par Ménard *et al* [91, 90] dans ce formalisme.

En RANS, plusieurs solutions sont envisageables pour décrire les sprays. Par exemple, considérer que le domaine de calcul est constitué de gouttes sphériques dès la sortie de l'injecteur ce qui constitue une hypothèse forte. Elles sont alors transportées de façon Lagrangienne ou Eulérienne par la phase porteuse. On peut également trouver dans la littérature des modèles RANS basés sur la description Eulérienne de la zone dense et évitant l'hypothèse de gouttes sphériques. Il faut néanmoins pouvoir décrire les fortes interactions entre la phase liquide et gazeuse dans cette zone. On a donc souvent à faire à des modèles analytiques basés sur l'idée qu'un ou plusieurs phénomènes physiques précis (turbulence, instabilités de surface, *etc*) sont à l'origine du phénomène d'atomisation primaire.

Enfin, la LES n'a pas encore été développée pour la zone d'atomisation primaire. On peut cependant trouver des travaux qui se sont intéressés à ce formalisme pour décrire ce type d'écoulement.

Dans les quelques sections suivantes nous allons donc détailler quelques modèles d'atomisation primaire, qui nous semblent représentatifs des approches actuelles dans ce domaine. On pourra ainsi mettre en lumière les avantages et les inconvénients des différents modèles.

2.2.1 Simulation numérique directe d'un écoulement liquide/gaz en atomisation

En DNS, un des problèmes est de représenter fidèlement la dynamique complexe de l'interface afin de rendre compte de l'interaction de cette dernière avec l'écoulements fluides, et si nécessaire avec le phénomène de turbulence. En effet, si l'on tient à représenter toutes les échelles de l'écoulement, il faut non seulement résoudre les échelles de la turbulence mais également celles relatives à la topologie de l'interface liquide/gaz. En outre, la description d'un écoulement liquide/gaz oblige à prendre en considération la force de tension de surface dans l'équation de la quantité de mouvement et les sauts de grandeurs physiques qui interviennent à l'interface. Or, la force de tension de surface est une force surfacique au sens où elle s'exprime uniquement au niveau de l'interface liquide/gaz. Elle est difficile à prendre en compte avec les méthodes basées sur des bilans volumiques qui servent généralement à résoudre les équations de la masse et de la quantité de mouvement. On peut exprimer la force de tension de surface dans la direction i : $F_{\sigma_i} = -\sigma \kappa n_i \delta_\Gamma$ où σ est le coefficient de tension de surface, κ la courbure de l'interface, n_i la composante en i de sa normale et enfin δ_Γ est une fonction de Dirac centrée sur la position de l'interface.

Une des techniques de suivi d'interface privilégiée dans le cas de maillage fixe est la méthode VOF (pour *Volume Of Fluid*), initiée par Hirt *et al* [45]. Cette méthode est basée sur le transport de la fraction de volume, qui s'exprime de la façon suivante pour la phase k :

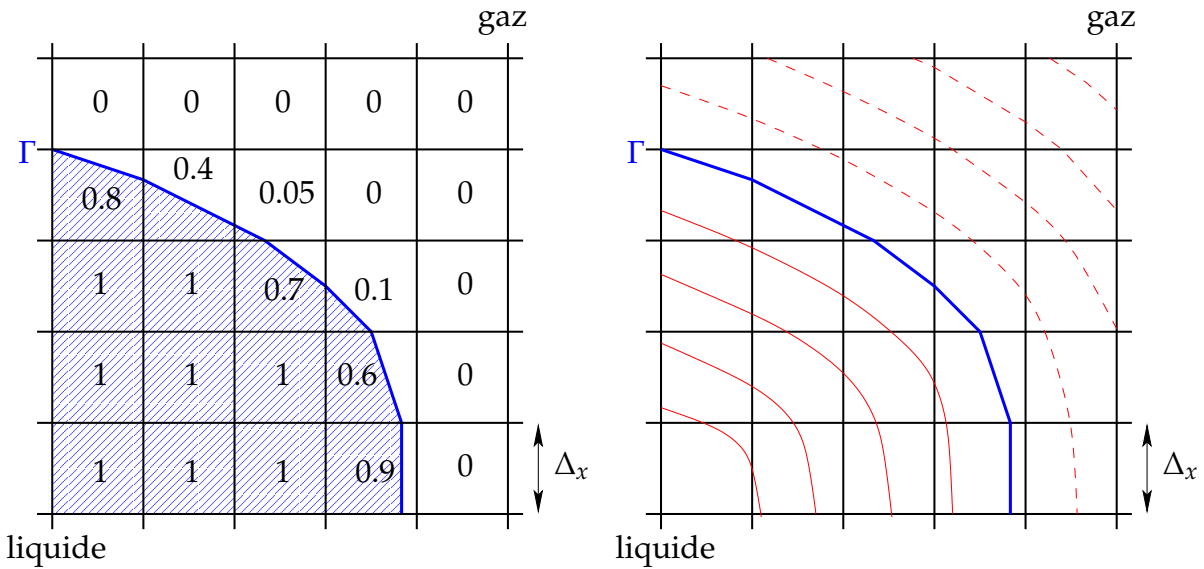
$$\frac{\partial \Phi_k}{\partial t} + \frac{\partial u_i \Phi_k}{\partial x_i} = 0 \quad . \quad (2.9)$$

Les caractéristiques de l'interface, comme sa normale ou encore sa courbure, sont alors déduites du champ de fraction de volume. La résolution de cette équation peut être réalisée pour une seule phase dans le cas liquide/gaz dans la mesure où l'on a $\Phi_l = 1 - \Phi_g$ au sein du même volume de contrôle, Ω .

Ici le volume de contrôle est clairement identifié, il s'agit du volume de la maille de calcul. Dans chaque cellule, les valeurs de la fraction de volume de la phase k sont donc les suivantes selon le taux de remplissage :

$$\Phi_k = \begin{cases} 1 & : \text{phase } k \text{ pur,} \\ 0 < \Phi_k < 1 & : \text{contient l'interface,} \\ 0 & : \text{absence de la phase } k . \end{cases} \quad (2.10)$$

Ce qui est illustré en deux dimensions sur la figure 2.1(a) où la valeur de la fraction de volume liquide est donnée dans chaque maille, la zone liquide est hachurée et l'interface symbolisée par la lettre Γ . Beaucoup de méthodes VOF ont été développées même si elles sont toutes basées sur le transport de la fraction de volume. La principale différence réside dans la façon dont l'interface est reconstruite. Ainsi la méthode VOF/PLIC (pour *piecewise linear interface construction/calculation*), proposée par Gueyffier *et al* [41], reconstruit au mieux l'interface avec des plans orientés par l'intermédiaire de relations algébriques, contrairement à certaines méthodes antérieures qui considéraient l'interface dans une cellule de calcul comme des plans parallèles à une des coordonnées du problème (méthodes dites *piecewise-constant*).



(a) Fraction de volume liquide des cellules, méthode VOF.

(b) Iso-lignes de φ , fonction distance à l'interface. Lignes pointillées : $\text{iso-}\varphi < 0$; Lignes continues : $\text{iso-}\varphi > 0$.

FIGURE 2.1 – Illustration, sur un maillage cartésien bidimensionnel, des deux méthodes Eulériennes de suivi d'interface : VOF (a) et level-set (b). L'interface, Γ , est symbolisée en trait gras (bleu).

Une autre méthode de suivi d'interface plus récente, également rencontrée en DNS, est la méthode *level-set*, développée par Osher *et al* [96]. Elle définit une fonction mathématique, φ , dans tout le domaine de calcul dont la courbe de niveau 0 est l'interface que l'on cherche à décrire, le signe de cette fonction indique dans quelle phase on se situe. La résolution d'une équation de convection permet alors de prédire le mouvement de l'interface. Cette équation est identique à la relation 2.9, *mutatis mutandis*. Outre le fait que le niveau 0 de la fonction φ indique la position de l'interface, la méthode *level-set* est construite de telle sorte que φ soit une fonction distance à l'interface, comme cela est illustré sur la figure 2.1(b) où les différentes lignes de niveau donnent la distance à l'interface. Cette propriété permet de multiplier les informations sur la position de l'interface dans les mailles situées loin de celle-ci, à la différence du VOF.

Ainsi, la fonction *level-set* est reconnue pour mieux prédire les changements topologiques que la méthode VOF et permet également de calculer plus facilement les caractéristiques géométriques du problème comme la courbure, κ , ou encore la normale à l'interface, $\vec{n}$. On ne détaillera pas plus cette méthode ici, mais de plus amples informations pourront être trouvées dans l'ouvrage de Sethian [114] sur le sujet.

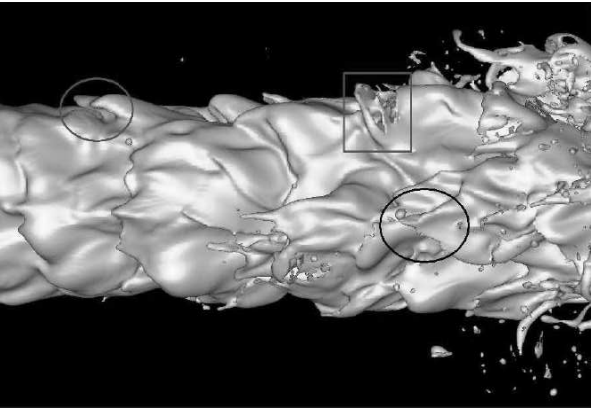
Quelle que soit la méthode de suivi d'interface utilisée, il faut néanmoins activement s'attacher à empêcher la diffusion numérique de la fraction de volume lors de la résolution de l'équation 2.9, afin de garder une vision discontinue de l'interface. Ainsi les méthodes VOF, même si la conservation de la masse est bien garantie, souffrent parfois de propriétés algébriques insuffisantes et de courants parasites [60] lorsque que l'on cherche à décrire des structures de l'interface dont les échelles caractéristiques sont de l'ordre de la taille de la maille de calcul. Concernant la *level-set*, les erreurs numériques dissipatives peuvent entraîner des pertes de masses importantes si le champ de vitesse est sous-résolu. Cependant des techniques ont été développées pour permettre de résoudre les problèmes évoqués. On citera, par exemple, les méthodes de raffinement de maillage dynamique autour de l'interface visant à obtenir une meilleure description de celle-ci et du champ de vitesse dans son alentour direct (c.f. Vincent *et al* [134]). On peut également chercher à combiner différentes méthodes de suivi d'interface afin de tirer le meilleur parti de chacune, c'est ce qu'a réalisé Menard [90] durant ces travaux de thèse où il combine la méthode VOF et *level-set*. Il convient de préciser que ces techniques ajoutent encore à la complexité et au coût numérique déjà conséquent en DNS.

La figure 2.2, montre l'interface liquide/gaz obtenue par Menard *et al* [90, 91] pour le cas de l'atomisation d'un jet dans des conditions d'injection proches du Diesel haute pression. L'injecteur est situé à droite, en (a), où une visualisation globale du cœur liquide est présentée. Celle-ci est clairement compatible avec les résultats expérimentaux obtenus par Idlahcen *et al* [46, 47] qui utilisent une technique d'imagerie balistique, figures 1.8 et 1.9. En effet, on peut observer un cœur liquide dense et connexe qui s'étend relativement loin dans l'injection (ici jusqu'à $24D_0$). Les instabilités de surface, proche injecteur, sont clairement visibles et on peut observer la présence de gouttelettes et de filaments de très petite taille qui sont néanmoins toujours capturés par le maillage DNS. De plus, ce type de calcul permet de mettre en lumière la dynamique de la formation

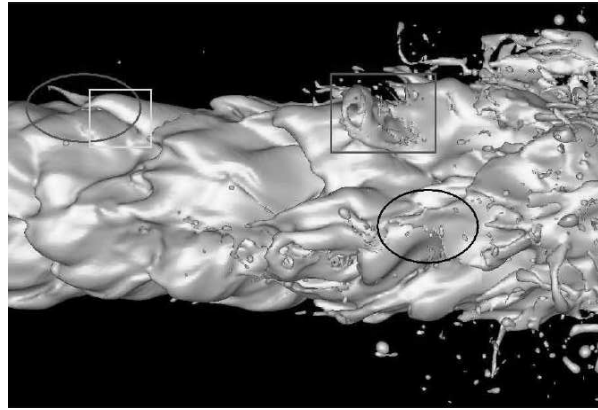
des ligaments, ce que l'on peut observer sur les figures 2.2(b) et (c) où est tracée l'interface liquide/gaz pour deux temps, t_1 et t_2 très rapprochés. Qui plus est, on se rend compte que l'hypothèse qui consiste à considérer des gouttes sphériques dès la sortie de l'injecteur ne correspond pas aux observations que l'on peut faire sur ces images.



(a) Vision globale du jet.



(b) Vue rapprochée de la sortie de l'injecteur au temps t_1 .



(c) Vue rapprochée de la sortie de l'injecteur au temps $t_2 > t_1$.

FIGURE 2.2 – Exemple de simulation DNS de l'atomisation d'un jet, résultats de Ménard *et al* [90, 91]. Maillage cartésien $256 \times 256 \times 2048$, diamètre d'injection $100 \mu m$. (a) présente l'interface liquide/gaz sur une vue globale du jet développé, (b) et (c) montrent une vue rapprochée où l'on peut observer la formation de ligaments.

Malgré ces résultats prometteurs, il reste le problème limitant du coût numérique inhérent au formalisme DNS. D'autant que, dans le cas de l'atomisation liquide/gaz, à mesure que l'injection se développe, la taille des structures liquides diminue de plus en plus pour former la zone diluée. Ceci oblige à disposer de mailles à même de décrire ces structures dont les dimensions spatiales, l_s , sont de l'ordre du μm pour un spray de plusieurs centimètres. Si bien qu'envisager de simuler le processus d'injection sur une longueur, L_t , équivalente à plusieurs centaines de diamètres de jet est difficile à l'heure actuelle sur des cas pratiques tant le rapport d'échelle, L_t/l_s , est grand.

Dans leurs travaux sur les jets liquides, Menard *et al* [90, 91] ont ainsi délibérément diminué la vitesse d'injection et augmenté légèrement le coefficient de tension de surface afin de ne pas avoir un critère sur le pas temps trop restrictif. En effet, au regard des conditions CFL (Courant *et al* [22]) ce critère dépend non seulement de la convection

et de la viscosité de façon classique, mais également de la courbure locale maximale de l'interface et cette relation n'est pas linéaire avec la taille de la maille, Δx .

Toutefois, l'observation des résultats démontre, ici de façon qualitative, que la DNS est un outil précieux, d'une part pour la compréhension de la dynamique de phénomènes à très petites échelles. Et d'autre part, à des fins de validation, les modèles RANS ou LES doivent rejoindre les résultats DNS, au moins statistiquement. Les comparaisons peuvent se faire directement sur les résultats, ce qui constitue une validation dite *a posteriori*. Considérer le comportement *a priori* des termes à fermer, tels R_{ij} en RANS ou τ_{ij} en LES, est également envisageable, toute la physique du problème en DNS étant, en théorie, résolue.

2.2.2 Modèle RANS d'atomisation

2.2.2.1 Méthode discrète pour un spray

Il existe deux façons de représenter un spray en CFD : l'approche dite « Eulérienne » et celle dite « Lagrangienne ». Dans l'approche Eulérienne les deux phases sont considérées comme un *continuum* dans tout le domaine fluide. C'est ce qui a été utilisé dans les travaux DNS présentés dans la section précédente. La valeur de la fraction de volume, Φ_k permet alors de décrire la phase k .

L'approche Lagrangienne pour les sprays représente la phase liquide par des particules individuelles (ou particules lagrangiennes) qui vont être transportées par la phase gazeuse, cette dernière étant, quant à elle, résolue de façon Eulérienne. En théorie il serait possible de faire correspondre à chaque particule lagrangienne, une goutte sphérique du spray possédant des propriétés individuelles, telles sa position, $\vec{x}_d$, sa vitesse, $\vec{v}_d$, sa masse, m_d ou encore sa température T_d (considérée uniforme pour toute la goutte), pour ne noter que les principales. Dans la pratique, et dans la mesure où ces grandeurs doivent être pilotées par un jeu d'équations pour chaque particule, décrire l'ensemble des gouttes d'un spray de cette manière peu devenir très vite prohibitif en terme de calcul et de quantité mémoire réclamée.

Si bien que la majorité des codes CFD disposant d'un module de spray, privilégient la représentation de chaque particule comme un échantillon stochastique d'une fonction de distribution, $f(\vec{x}, t, m, \vec{v}, T)$, qui caractérise la statistique du spray dans son ensemble. Cette fonction de distribution correspond à la probabilité de présence de gouttes dans un volume $d\vec{x}$ centré autour de $\vec{x}$ à l'instant t , ayant une vitesse comprise entre $\vec{v}$ et $\vec{v} + d\vec{v}$, une masse comprise entre m et $m + dm$ et une température comprise entre T et $T + dT$. À partir de cette fonction de distribution il est ainsi possible de calculer le nombre de gouttes par unité de volume à une position donnée à l'instant t . Dans cette optique, une particule lagrangienne peut alors représenter plusieurs gouttes partageant les mêmes propriétés. Une équation d'évolution de cette fonction de distribution a été proposée par Williams [140] dont l'expression est :

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial \vec{v} f}{\partial \vec{x}} - \frac{\partial \dot{m} f}{\partial m} - \frac{\partial \dot{\vec{v}} f}{\partial \vec{v}} - \frac{\partial \dot{T} f}{\partial T} + Q + \Gamma . \quad (2.11)$$

Cette équation prend en compte la décroissance/croissance de la taille des gouttes, les

interactions entre celles-ci (collision, coalescence) à travers le terme source Q , les effets des forces aérodynamiques, l'évaporation et enfin la création de gouttes par rupture secondaire à travers le terme source Γ . La résolution de l'équation de Williams entre chaque pas de temps de la simulation permet alors de mettre à jour l'état de chaque particule stochastique afin de permettre leur transport³. La fermeture des termes sources dans cette dernière équation nécessite des modèles spécifiquement adaptés aux sous-processus régissant le spray. Ainsi, dans la zone diluée de nombreux modèles ont vu le jour même s'il faut prendre des précautions concernant les échanges de masse, de quantité de mouvement ou encore d'énergie entre la phase porteuse et les particules. On se reportera à l'ouvrage de Sirignano [119] concernant ce point pour de plus amples informations.

Néanmoins, autant l'hypothèse de gouttes sphériques peut être faite dans la zone diluée où elle est vérifiée expérimentalement, autant cette hypothèse dès la sortie de l'injecteur peut poser problème car on se situe dans zone primaire d'atomisation que l'on sait dense. En outre, même si l'on ne tient pas à résoudre explicitement l'écoulement dans cette zone, il faut pouvoir initier les particules Lagrangiennes de façon réaliste en proche sortie d'injecteur, par exemple à une certaine distance, d de celui-ci, où l'hypothèse de phase dispersée devient valide. C'est à ce point qu'interviennent les modèles d'atomisation primaire. Plusieurs choix sont possibles :

- On peut se donner directement les formes des fonctions de distribution en diamètre et en vitesse des gouttes à partir de données expérimentales. La détermination du nombre et de la vitesse de chaque particule lagrangienne nécessite alors de connaître le débit de l'injecteur ainsi que son coefficient de décharge. Ceci revient à considérer l'atomisation primaire comme une condition limite de l'écoulement comme cela est schématisé sur la figure 2.3 où les particules Lagrangiennes sont initiées à la distance d .
- La considération des phénomènes physiques à l'origine du fractionnement primaire peut également permettre de déterminer ces conditions initiales. Ceci nécessitant souvent une connaissance des mécanismes prépondérants dans le processus d'atomisation pour un injecteur donné.

Ainsi, dans tous les cas l'approche Lagrangienne pour les sprays nécessite la connaissance préalable d'un certain nombre de paramètres de l'injection elle-même, comme la vitesse des gouttes, l'angle de spray ou encore la distribution en diamètre, *etc.*

Notons que l'approche Lagrangienne, beaucoup utilisée en RANS, n'est pas uniquement reliée à ce formalisme. Son utilisation en LES est également largement répandue pour décrire les sprays. Les modélisations diffèrent alors quelque peu du formalisme RANS afin de bénéficier des informations au niveau de l'échelle résolue. Cependant les remarques concernant la zone dense sont exactement les mêmes, la présence de gouttes liquides sphériques dès la sortie de l'injecteur étant difficilement envisageable.

3. Précisons que la résolution de cette équation peut être réalisée sur un maillage Eulérien mais cette solution reste peu utilisée pour l'atomisation.

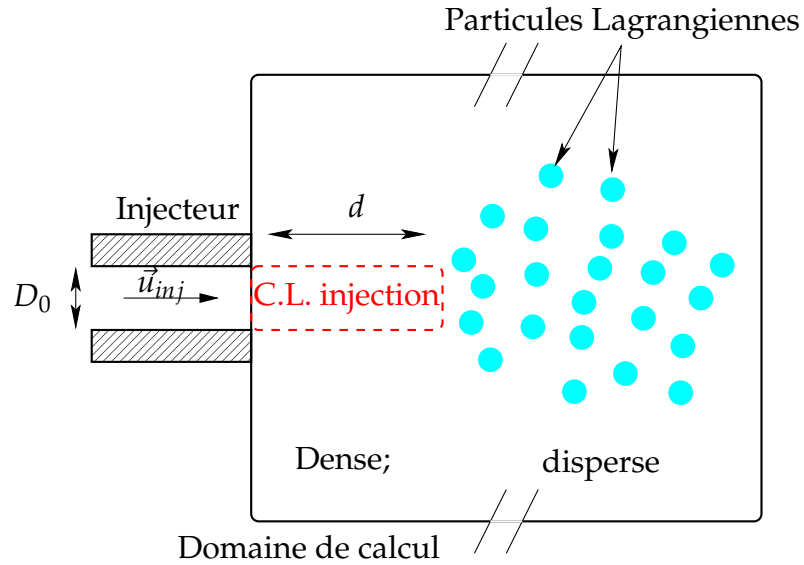


FIGURE 2.3 – Représentation Lagrangienne d'un spray où les particules sont initiées à partir d'une condition limite d'injection, symbolisée ici en trait pointillé rouge .

2.2.2.2 Corrélation d'Elkottb [29]

C'est une méthode purement empirique qui considère que le jet est directement fractionné à la sortie de l'injecteur en gouttes dont le « diamètre moyen de Sauter », D_{32} , est identique. Ce diamètre moyen est défini comme le diamètre d'une goutte qui a le même ratio volume/surface que la totalité du spray :

$$D_{32} = \frac{\text{Volume du spray}}{\text{Surface du spray}} . \quad (2.12)$$

Elkottb [29] propose alors la relation suivante pour déterminer D_{32} :

$$D_{32} = 3.08 \times 10^6 \nu_l^{0.385} \sigma^{0.737} \rho_l^{0.737} \rho_g^{0.706} \Delta P^{-0.54} , \quad (2.13)$$

avec ΔP le différentiel de pression entre l'amont et l'aval de l'injecteur :

$$\Delta P = \frac{\rho_l u_{inj}^2}{2C_d^2} , \quad (2.14)$$

ici C_d est un coefficient de décharge dans l'injecteur.

Il est à remarquer que la relation empirique 2.13 ne fait pas apparaître explicitement les nombres sans dimensions, Re , We ou encore Oh . Le diamètre D_{32} n'est pas non plus influencé par le diamètre de l'injecteur et la vitesse d'injection n'apparaît que dans l'expression du différentiel de pression, ΔP .

2.2.2.3 Corrélation d'Hiroyasu-Arai-Tabata [43]

C'est également une méthode empirique qui donne un diamètre moyen de Sauter, D_{32} , à la sortie de l'injecteur. Hiroyasu *et al* [43] proposent une relation basée sur les résultats de leurs mesures expérimentales :

$$D_{32} = \max \begin{cases} 4.12 Re_l^{0.12} We_l^{-0.75} \left(\frac{\mu_l}{\mu_g} \right)^{0.54} \left(\frac{\rho_l}{\rho_g} \right)^{0.18} D_{inj} \\ 0.38 Re_l^{0.25} We_l^{-0.32} \left(\frac{\mu_l}{\mu_g} \right)^{0.37} \left(\frac{\rho_l}{\rho_g} \right)^{-0.57} D_{inj} \end{cases} \quad (2.15)$$

Cette fois on voit apparaître les nombres de Reynolds et de Weber, et D_{32} dépend du diamètre de l'injecteur.

2.2.2.4 Le modèle « WAVE »

Le modèle « WAVE » est l'un des plus utilisé (notamment dans les codes commerciaux) afin de prendre en compte le fractionnement dans la zone primaire d'atomisation. Il est basé sur l'étude de l'instabilité linéaire de Kelvin-Helmoltz, d'un jet rond de liquide injecté dans un environnement gazeux (c.f. 1.3.2). Originellement développé par Reitz [105], ce modèle a été quelque peu étendu par la suite pour prendre en compte d'autres types d'instabilités ou encore faire un lien avec l'écoulement dans l'injecteur. On rappelle seulement, dans cette section, le principe de base de cette modélisation.

Le modèle initial L'hypothèse de base de Reitz [105] suppose, comme cela à été mentionné, que l'atomisation est due au développement d'instabilités de surface de type Kelvin-Helmoltz (KH), dont on présente un schéma figure 2.4 où l'on se place dans un repère cylindrique.

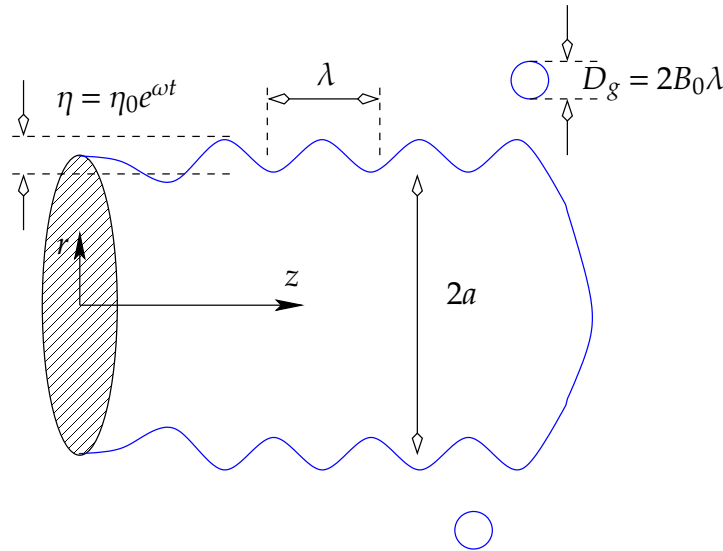


FIGURE 2.4 – Étude linéaire d'une colonne liquide, instabilité de surface de type Kelvin-Helmholtz pour le modèle « WAVE » [105].

Combiné au formalisme lagrangien, le modèle cherche à obtenir le rayon, r_f , des premières gouttes générées par les instabilités de KH ainsi que leurs vitesses longitudinales, u_0 et radiales, v_0 . La colonne liquide est représentée par des particules liquides (ou « blobs » c.f. Reitz *et al* [107]) qui, initialement, ont un diamètre équivalent à la buse

d'injection, $D_0 = 2a$ avec a le rayon de la buse. Ces particules liquides initiales qui sortent de la buse d'injection seront appelées « gouttes mères » car c'est à partir de celles-ci que seront générées les « goutte(s) fille(s) » de rayon r_f par rupture. Le débit de carburant à la sortie de l'injecteur donne la fréquence d'apparition des « gouttes mères ». Une analyse linéaire permet alors à l'auteur de déterminer la longueur d'onde, λ_{KH} , dont l'amplitude croît le plus rapidement et associée au taux d'accroissement ω_{KH} . Ces derniers peuvent être exprimés en fonction des nombres de Weber, We , et d'Ohnesorge, Oh , en notant r_m le rayon de la « goutte mère » :

$$\lambda_{KH} = 9.02 r_m \frac{(1 + 0.45 \sqrt{Oh})(1 + 0.4 T_a^{0.7})}{(1 + 0.865 We_g^{1.67})^{0.6}} , \quad (2.16)$$

$$\omega_{KH} = \sqrt{\frac{\sigma}{\rho_l a^3}} \frac{(0.34 + 0.385 We_l^{0.15})}{(1 + Oh)(1 + 1.4 T_a^{0.6})} , \quad (2.17)$$

avec $T_a = Oh \sqrt{We_g}$. Ceci permet d'exprimer le rayon, r_f , des « gouttes filles » tel que :

$$r_f = \begin{cases} B_0 \lambda_{KH} & \text{si } B_0 \lambda_{KH} \leq a, \\ \min \left[\left(\frac{3\pi a^2 u_l}{2\omega_{KH}} \right)^{1/3} ; \left(\frac{3a^2 \lambda_{KH}}{4} \right)^{1/3} \right] & \text{si } B_0 \lambda_{KH} > a \text{ (régime de Rayleigh)}, \end{cases} \quad (2.18)$$

où B_0 est une constante de modélisation, souvent prise à $B_0 = 0.61$. Le cas $B_0 \lambda_{KH} > a$ permet de rejoindre les résultats du régime de Rayleigh (c.f. 1.3.3). Néanmoins, l'injection haute pression se situe dans le régime d'atomisation, ainsi le rayon des « gouttes filles » sera plutôt de l'ordre de λ_{KH} . On voit ainsi que la taille de la « goutte fille » est donnée par le volume contenu dans une onde de longueur λ_{KH} . Le modèle « WAVE » prévoit également que la goutte initiale de rayon a ne se scinde pas instantanément en totalité en « gouttes filles » en utilisant une loi d'évolution temporelle linéaire pour le rayon r_m :

$$\frac{dr_m}{dt} = -\frac{r_m - r_f}{\tau_{BU}} , \text{ avec } r_m(t = t_0) = a , \quad (2.19)$$

τ_{BU} est alors un temps de relaxation qui correspond à un temps caractéristique de rupture. Ainsi « la goutte mère » doit avoir subi une rupture totale au bout de ce temps τ_{BU} , comme cela est schématisé sur la figure 2.5. Ce temps peut être obtenu à partir de λ_{KH} , ω_{KH} et le rayon de la « goutte mère », tel que :

$$\tau_{BU} = 3.726 B_1 \frac{r_m}{\lambda_{KH} \omega_{KH}} , \quad (2.20)$$

où B_1 est une constante de modélisation, Reitz [105] propose, $B_1 \simeq 10$, considérant tout de même que cette valeur est susceptible de changer selon la géométrie de l'injecteur.

Enfin, concernant la vitesse et l'angle de spray, le modèle « WAVE » propose des relations supplémentaires. Ainsi, la vitesse débitante est déterminée en fonction de ΔP , le différentiel de pression entre l'injecteur et la chambre de combustion, par la relation de Bernoulli :

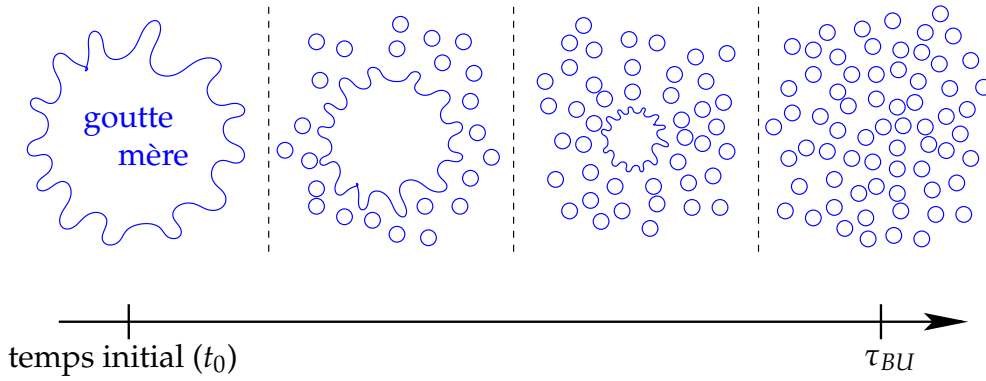


FIGURE 2.5 – Schéma de la désintégration d'une « goutte mère » pendant le temps de rupture τ_{BU} , selon le modèle « WAVE » [105].

$$u_0 = C_d \sqrt{(2\Delta P/\rho_l)} , \quad (2.21)$$

où C_d est un coefficient de décharge qui va, lui aussi, dépendre des caractéristiques géométriques de l'injecteur. La composante de la vitesse radiale, notée v_0 , est donnée par la relation suivante :

$$v_0 = u_0 \tan \frac{\theta}{2} , \quad (2.22)$$

où θ est l'angle du spray, donné par la relation suivante :

$$\tan \frac{\theta}{2} = A_1 \lambda \frac{\omega}{u_0} , \quad (2.23)$$

La composante de la vitesse radiale, v_0 , est donc uniformément distribuée entre 0 et θ . Dans cette dernière relation A_1 est une constante de modélisation qui dépendra, une fois de plus, de l'injecteur que l'on cherche à simuler.

Exemple d'extension du modèle « WAVE » Patterson et Reitz [97] proposent de prendre en compte, en plus, les instabilités de Rayleigh-Taylor sur la colonne liquide. L'instabilité, entre Kelvin-Helmoltz et Rayleigh-Taylor qui provoque l'onde dont le taux d'accroissement est le plus élevé est alors choisie pour modéliser le fractionnement primaire.

Comme résultats principaux, les auteurs obtiennent la longueur d'onde, λ_{RT} et le taux d'accroissement, ω_{RT} , associés à l'instabilité de Rayleigh-Taylor de façon identique au paragraphe précédent, par analyse linéaire et étude du comportement en fonction des nombres adimensionnels :

$$\lambda_{RT} = \frac{4\pi}{\rho_g u_r} \sqrt{\frac{2\sigma \rho_l r_m}{C_d}} , \quad (2.24)$$

$$\omega_{RT} = \frac{u_r}{2} \sqrt{\frac{C_d \rho_g u_r}{2\rho_l r_m}} \sqrt{\frac{2}{C_d r_m \sigma}} , \quad (2.25)$$

où u_r est la vitesse relative liquide/gaz. L'expression du temps de rupture, τ_{BU} , dans la relation 2.19 change en considérant cette dernière instabilité :

$$\tau_{BU} = \sqrt{\frac{8\rho_l}{C_d\rho_g}} \sqrt{\frac{2}{C_d We_l}} . \quad (2.26)$$

2.2.2.5 Le modèle « ELSA »

Le modèle «ELSA» (Euler-Lagrange pour les Sprays et l'Atomisation) est un modèle complet d'atomisation pour les hauts nombres de Weber et de Reynolds. Développé initialement par Vallet *et al* [129, 130], il présente la particularité de prendre en compte la zone dense proche injecteur grâce à un formalisme Eulérien considérant que celui-ci est plus adapté pour décrire les fortes interactions entre les phases. Le principe de l'approche Eulérienne est de considérer les 2 phases comme un seul fluide avec une masse volumique fortement variable. Il définit alors une vitesse unique pour le mélange liquide/gaz, $\bar{U}_j$, ainsi qu'une pression $\bar{P}$ et la masse volumique $\bar{\rho}$ pour ce dernier. Plus tard, sous l'impulsion des travaux de Blokkeel *et al* [11, 12] le modèle s'est vu adjoindre la possibilité de coupler la description Eulérienne en zone dense avec une représentation Lagrangienne en zone diluée. Cependant on se contentera ici de présenter les équations du modèle dans la zone dense concernant le transport de la fraction de liquide.

En premier lieu, notons que les variables du modèle sont décrites en moyenne de Favre symbolisée par l'opérateur $(\bullet)$. Considérant ρ la masse volumique, Favre propose la décomposition suivante pour une variable hydrodynamique quelconque, A , où la moyenne est pondérée par la masse volumique :

$$\begin{cases} \rho = \bar{\rho} + \rho' \\ A = \bar{A} + A'' \end{cases} \quad \text{avec} \quad \bar{\rho}\bar{A} = \overline{\rho A} . \quad (2.27)$$

L'utilisation de la moyenne de Favre est un choix d'écriture. En effet, il serait possible d'utiliser la décomposition et la moyenne de Reynolds classiquement définies.

En premier lieu, le modèle résout l'équation de transport de la vitesse moyenne du mélange en utilisant le modèle de turbulence standard, $k-\varepsilon$ (c.f. Launder *et al* [63]). Dans ce modèle cette équation de transport s'écrit :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \bar{U}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \bar{U}_i \bar{U}_j}{\partial x_j} = - \frac{\partial R_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} \quad \text{avec} \quad R_{ij} = \bar{\rho} \widetilde{U_i'' U_j''} . \quad (2.28)$$

Les termes de viscosité laminaire et de tension de surface sont négligés en considérant l'hypothèse que l'écoulement est à hauts nombres de Weber et de Reynolds. Le tenseur de Reynolds R_{ij} est donc fermé grâce à la résolution de 2 équations de transport supplémentaires : une pour l'énergie cinétique turbulente, $\bar{k} = 1/2 \widetilde{U_i'' U_i''}$, et une pour la dissipation turbulente, $\bar{\varepsilon} = 2\nu \overline{\partial U_i'' / \partial x_j \partial U_i'' / \partial x_j}$. Ces 2 équations s'écrivent dans le modèle $k-\varepsilon$:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{k}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{U}_j \tilde{k}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{Sc_{t,k}} \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_j} \right) - \bar{\rho} R_{ij} \frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial x_i} - \overline{U_j''} \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_j} - \bar{\rho} \tilde{\varepsilon} , \quad (2.29)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\varepsilon}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{U}_j \tilde{\varepsilon}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{Sc_{t,\varepsilon}} \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x_j} \right) - C_{\varepsilon 1} \frac{\tilde{\varepsilon}}{k} \left(-\bar{\rho} R_{ij} \frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial x_i} - \overline{U_j''} \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_j} \right) - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}^2}{k} , \quad (2.30)$$

où $Sc_{t,k}$ et $Sc_{t,\varepsilon}$ sont des nombres de Schmidt pris à 1 et 1.22 respectivement, $C_{\varepsilon 1}$ et $C_{\varepsilon 2}$ sont des constantes de modélisation. De manière classique le tenseur de Reynolds est fermé en utilisant l'hypothèse de Boussinesq :

$$\overline{U_i U_j} = -\nu_t \left(\frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{U}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) + \frac{2}{3} \tilde{k} \delta_{ij} \quad \text{avec} \quad \nu_t = C_\nu \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\varepsilon}} . \quad (2.31)$$

Pourtant développé dans le cadre monophasique, Demoulin *et al* [26] ont montré que le modèle k - ε était capable de bien reproduire les caractéristiques de la turbulence dans le cadre liquide/gaz, moyennant une attention particulière concernant le terme de flux turbulent de masse liquide que nous allons introduire.

En effet, le modèle définit $\bar{\Phi}_l$, la fraction volumique de liquide moyenne et $\tilde{Y}_l$, la fraction de liquide massique. Ces deux variables sont reliées par la relation suivante :

$$\tilde{Y}_l = \frac{\rho_l \bar{\Phi}_l}{\bar{\rho}} , \quad (2.32)$$

où $\bar{\rho}$ est définie comme la masse volumique moyenne. Elle s'exprime en fonction de la fraction de volume moyenne de liquide, $\tilde{Y}$ et de ρ_l et ρ_g les masses volumiques des phases, liquide et gaz respectivement :

$$\frac{1}{\bar{\rho}} = \frac{\tilde{Y}_l}{\rho_l} + \frac{1 - \tilde{Y}_l}{\rho_g} . \quad (2.33)$$

L'équation de transport de la fraction massique moyenne de liquide s'écrit, en négligeant l'effet de la vaporisation ⁴ :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_l}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{U}_j \tilde{Y}_l}{\partial x_j} = - \frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{U_j'' Y_l''}}{\partial x_j} . \quad (2.34)$$

Dans cette dernière équation $\tilde{U}_j$ est la composante dans la direction i de la vitesse moyenne liquide/gaz. Le terme, $\widetilde{U_j'' Y_l''}$, du membre de droite, non fermé, est important car c'est ce terme qui va rendre compte de la dispersion du liquide due aux fluctuations turbulentes. Il peut également être vu comme un terme de glissement moyen entre les phases à travers la relation exacte :

$$\widetilde{U_i'' Y_l''} = \tilde{Y}_l (1 - \tilde{Y}_l) (\overline{u_{\tilde{Y}_l,i}|l} - \overline{u_{\tilde{Y}_l,i}|g}) = \tilde{Y} (\overline{u_{\tilde{Y}_l,i}|l} - \tilde{U}_i) , \quad (2.35)$$

4. Ceci n'est pas utile pour nos propos mais on notera tout de même que ce terme est présent dans la modélisation « ELSA » complète et a fait l'objet d'un effort de modélisation conséquent.

où $\overline{u_{\tilde{Y}_{l,i}}|_l}$ et $\overline{u_{\tilde{Y}_{l,i}}|_g}$ sont les vitesses moyennes conditionnées par les phases, liquide et gaz respectivement. Cette dernière relation met clairement en évidence que le terme de flux turbulent est fortement lié au différentiel de vitesse entre les phases.

Sa fermeture requiert donc une attention particulière, et a fait l'objet d'une recherche approfondie durant les travaux de thèse de Beau [6] puis Lebas [65]. Au final, avec une telle approche on peut raccorder la vision Eulérienne proche injecteur avec une vision Lagrangienne dans la zone diluée. Pour ce faire, le diamètre moyen de Sauter, D_{32} , le nombre de gouttes par unité de volume, n_d et les trois composantes de vitesse du liquide $\overline{u_{l,i}}$ des particules Lagrangiennes sont initialisés à partir des grandeurs Eulériennes, suivant l'approche la plus simple, de la manière suivante :

$$D_{32} = \frac{6\tilde{Y}_l}{\rho_l\tilde{\Omega}} , \quad n_d = \frac{\rho_l^2\tilde{\rho}\tilde{\Omega}^3}{36\pi\tilde{Y}_l^2} \quad \text{et} \quad \overline{u_{l,i}} = \tilde{U}_i + \frac{\widetilde{U_j''Y_l''}}{\tilde{Y}_l} , \quad (2.36)$$

où $\tilde{\Omega}$ est la densité d'interface liquide/gaz par unité de masse. L'utilisation de cette grandeur, initialement introduite dans le modèle par Vallet *et al* [129, 130], a pour but de s'affranchir de la vision sphérique des gouttes proche injecteur. Basée sur une analogie avec l'équation de transport de densité de surface de flamme, introduite par Marble *et al* [85], Vallet *et al* [129, 130] postulent la forme suivante pour le transport de $\tilde{\Omega}$:

$$\frac{\partial \tilde{\rho}\tilde{\Omega}}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{\rho}\tilde{U}_j\tilde{\Omega}}{\partial x_j} = -\frac{\partial \tilde{\rho}\widetilde{U_j''\Omega''}}{\partial x_j} + \sum_i \tilde{\rho}\tilde{\Omega}_i . \quad (2.37)$$

L'ensemble des $\tilde{\Omega}_i$ sont relatifs à des termes sources choisis pour rendre compte des processus agissant sur la création ou la destruction d'interface, tels le phénomène de vaporisation ou encore les instabilités de surface. On reviendra plus en détail sur cette dernière relation dans le chapitre 4.

On comprend dès lors que ce modèle est construit autour de 2 équations importantes :

- La relation 2.34 qui modélise la dispersion du liquide dans la chambre de combustion,
- et la relation 2.37 qui modélise les phénomènes physiques agissant sur la production et la destruction de la densité d'interface et qui, par conséquent, vont influencer sur la taille et le nombre des gouttes liquides Lagrangiennes dans la phase dispersée (c.f. relations 2.36).

Ces deux équations nécessitent des fermetures, néanmoins on s'intéresse seulement ici à la fermeture du flux turbulent $\widetilde{U_i''Y_l''}$. Dans sa version initiale une fermeture au premier ordre de ce terme a été proposée. Elle consiste à le fermer par une loi de diffusion du type « gradient » de la manière suivante :

$$\widetilde{U_i''Y_l''} = -\frac{\nu_t}{Sc_t} \frac{\partial \tilde{Y}_l}{\partial x_i} , \quad (2.38)$$

où ν_t est un coefficient de viscosité turbulente et Sc_t un nombre de Schmidt également turbulent. Cependant, Beau [6] dans ses travaux de thèse a montré que cette fermeture simple n'était pas toujours compatible avec la relation exacte 2.35. L'auteur a donc proposé deux fermetures au second ordre, *i.e.* en résolvant une équation de transport supplémentaire pour $\bar{\rho}\widetilde{U_i''Y_l''}$.

La première fermeture est basée sur une analogie entre la variable d'avancement moyenne, utilisée dans le domaine de la combustion turbulente pré-mélangée, et la fraction massique de liquide. En effet, dans leurs travaux Bailly *et al* [2] proposent une équation de transport pour la variable d'avancement moyenne que Beau [6] adapte pour le transport du flux turbulent, qui s'exprime :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho}\widetilde{U_i''Y_l''}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho}\widetilde{U_j}\widetilde{U_i''Y_l''}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{Sc_t} \frac{\partial \widetilde{U_i''Y_l''}}{\partial x_j} \right) \\ - C_{1,1}\bar{\rho}\widetilde{U_j''Y_l''} \frac{\partial \widetilde{U_i}}{\partial x_j} - C_{1,2}\bar{\rho}\widetilde{U_i''Y_l''} \frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_j} - C_{1,3} \frac{\partial \bar{\rho}\widetilde{U_i''Y_l''}}{\partial \tau_t} , \end{aligned} \quad (2.39)$$

où $C_{1,1}$, $C_{1,2}$ et $C_{1,3}$ sont des constantes de modélisation. Dans cette équation, le premier terme du membre de droite est une modélisation par une « loi gradient » du terme de diffusion turbulente de $\widetilde{U_i''Y_l''}$. Les 3 autres termes du membre de droite sont des termes sources. Le premier rend compte des effets du gradient de vitesse moyen sur le flux turbulent de liquide, le deuxième modélise les effets de gradient de fraction massique de liquide moyen également sur le flux turbulent de liquide. Enfin le troisième terme rend compte des effets dissipatifs de la turbulence sur $\widetilde{U_i''Y_l''}$. Il est à remarquer que ce dernier terme fait intervenir un temps caractéristique de retour à l'équilibre, τ_t , pour le flux turbulent de liquide pris comme un temps turbulent.

Beau [6] remarque tout de même que l'utilisation d'un temps turbulent pour l'équation 2.39 revient à considérer que le glissement entre les phases est principalement contrôlé par la turbulence et que les effets de trainée sont négligés. L'auteur reprend alors une partie des travaux de Simonin [118] basée cette fois sur la modélisation du glissement entre les phases liquide/gaz prenant en compte les effets de trainée par l'intermédiaire d'un temps caractéristique de trainée, τ_p . Beau obtient alors la fermeture au second ordre suivante pour le flux turbulent de liquide :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho}\widetilde{U_i''Y_l''}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho}\widetilde{U_j}\widetilde{U_i''Y_l''}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{Sc_t} \frac{\partial \widetilde{U_i''Y_l''}}{\partial x_j} \right) \\ - C_{2,1}\bar{\rho}\widetilde{U_j''Y_l''} \frac{\partial \widetilde{U_i}}{\partial x_j} - C_{2,2}\bar{\rho}\widetilde{U_i''Y_l''} \frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_j} \\ - \frac{C_{2,3}}{\tau_p(1-\widetilde{Y})} \left(\bar{\rho}\widetilde{U_i''Y_l''} + \bar{\rho}D_{lg,t} \frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_i} \right) . \end{aligned} \quad (2.40)$$

On remarque que cette équation est similaire à 2.39, seul le dernier terme du membre de droite diffère. En premier lieu, le temps turbulent est remplacé par un temps de trainée et

on peut remarquer la présence d'un coefficient de dispersion liquide/gaz, $D_{lg,t}$ construit pour que le flux turbulent dégénère vers une loi de type « gradient » lorsque τ_p tend vers 0. Sans aller plus loin dans la description de ce modèle, notons tout de même que ce temps caractéristique de trainée dépend du diamètre moyen des gouttes relevé dans la cellule de calcul, si bien que l'équation 2.34 de transport de la fraction massique de liquide, $\tilde{Y}$, se retrouve couplée avec celle de la densité d'interface liquide/gaz 2.37 par le biais des relations 2.36 dans cette modélisation.

2.2.3 Simulation aux grandes échelles pour l'atomisation primaire

D'une manière générale, l'utilisation du formalisme LES pour résoudre les écoulements liquide/gaz est relativement récente. La considération d'un tel écoulement peut recouvrir deux visions selon les échelles de l'interface :

- I. Soit les plus petites inclusions de l'interface peuvent être décrites par le maillage, auquel cas on peut espérer découpler le suivi d'interface et la modélisation de la turbulence en LES.
- II. Dans le cas contraire, il est probable qu'il faille tenir compte des structures en sous maille et rendre compte de leurs interactions avec la turbulence.

Dans le cas I, on peut relever de nombreux des travaux en LES réalisés dans le cadre d'écoulements en surface libre et de déferlements de vagues, ce que proposent par exemple Hieu *et al* [42], Christensen [19] ou encore Lubin *et al* [81]. Pour la plupart, ces auteurs proposent de prendre en compte la turbulence grâce aux modèles classiquement développés dans le cadre monophasique (principalement Smagorinsky [120]) et de suivre l'interface avec la méthode VOF, ce que l'on pourra nommer la méthode « LES/VOF ». Les résultats qu'ils obtiennent sont en bon accord avec les études expérimentales et il semble que pour ce type d'écoulement cette méthodologie soit suffisante. Néanmoins, certains auteurs considèrent d'une manière générale que, même si l'interface est bien décrite par le maillage, ce n'est pas pour autant que la turbulence n'est pas influencée par la présence de celle-ci. En outre, Lakehal *et al* [78, 103, 61] estiment qu'autour de l'interface, l'écoulement peut se concevoir comme un écoulement en proche paroi où l'on sait que le modèle de Smagorinsky standard [120] surestime la dissipation de sous maille. Par conséquent, qu'il est nécessaire d'en tenir compte dans le modèle de turbulence. Ils proposent ainsi un modèle LES de turbulence qui, à l'instar de ceux utilisés en proche paroi (c.f. [98]), prend en compte la distance à l'interface, et ce, grâce à la fonction *level-set*.

La LES de l'atomisation primaire se situerait plutôt dans le cas II, étant donné que l'on va vouloir augmenter la taille des mailles de calcul par rapport à la DNS. Pour prendre en compte le fractionnement primaire on peut, à l'instar des modèles RANS, considérer la zone dense comme une condition limite de de l'écoulement, ce qui rejoint la situation illustrée sur la figure 2.3. C'est ce que proposent, par exemple, Martinez *et al* [88] pour leur modèle DITurBC (*Downstream Inflow Boundary Conditions*) pour le formalisme Eulérien. Celui-ci se base sur plusieurs modèles physiques pour prendre en compte la cavitation dans l'injecteur, la turbulence et le fractionnement primaire. Ceci

Référence	$U_{inj}(m.s^{-1})$	$D_0(mm)$	$Re_l(\times 10^3)$	$We_l(\times 10^5)$	$\Delta_x^{min}(\mu m)$
De Villiers <i>et al</i> [23]	460	0.2	15.5	13.6	10
Buonfiglioli <i>et al</i> [14]	460	0.2	15.5	13.6	5
Bianchi <i>et al</i> [39]	50	0.13	1.6	0.11	4
Bianchi <i>et al</i> [39]	270	0.13	8.7	3.4	4

TABLE 2.1 – Configurations testées, par différents auteurs, pour des jets d'atomisation en LES.

permet alors d'obtenir les profils moyens de vitesse, fraction de volume et le diamètre des gouttes à une distance D_{exit} que les auteurs estiment à $D_{exit} = 10D_0$. Le modèle est en bon accord avec les expériences dans des conditions similaires. Toutefois notons qu'il est nécessaire de connaître le régime d'atomisation de l'injecteur et les intensités de turbulence et de cavitation.

On peut néanmoins tenter de résoudre la zone primaire d'atomisation, la méthode Eulérienne va alors être privilégiée dans ce cas. Il existe relativement peu de travaux et de modélisations relatives à ce type d'écoulements. On peut citer les travaux de De Villiers *et al* [23], qui font office de précurseurs en la matière pour une configuration proche de l'injection Diesel. Plus tard, Buonfiglioli *et al* [14] et Bianchi *et al* [39] réalisent le même type d'études en testant différentes configurations, différents schémas de discrétisation et en raffinant le maillage. Tous ces auteurs décident d'utiliser la méthodologie LES/VOF, c'est-à-dire le modèle de Smagorinsky [120] pour la turbulence et la méthode VOF/PLIC pour décrire l'interface liquide/gaz. Ces différentes études vont mettre en lumière quelques points intéressants concernant l'utilisation de la LES pour ce type d'écoulement.

Les configurations testées sont résumées sur le tableau 2.1 en fonction des différents auteurs. En premier lieu, notons que toutes ces études sont réalisées sur des jets ronds issus d'un injecteur de diamètre D_0 . On remarque que Buonfiglioli *et al* [14] testent exactement la même configuration que De Villiers *et al* [23], à ceci près que, Δ_x^{min} , la taille de la maille dans la zone du cœur liquide est plus petite. Les conclusions de ces deux études ne sont pas très différentes. Bianchi *et al* [39] testent deux configurations avec des vitesses d'injection et des nombres de Reynolds moins élevés mais proposent de tester un cas laminaire (avec $U_{inj} = 50m.s^{-1}$) et un cas turbulent ($U_{inj} = 270m.s^{-1}$). Il convient de préciser que tous ces auteurs proposent de simuler l'écoulement en amont de l'injecteur dans un cylindre de diamètre D_0 et de longueur L . Ils cherchent alors à caractériser l'effet du rapport L/D_0 sur l'atomisation. Par contre, seuls Buonfiglioli *et al* [14] imposent des perturbations de vitesses aux conditions limites en amont. Cependant, ils notent que cela a peu d'influence sur le comportement global du jet en aval. On se basera principalement sur les conclusions de De Villiers *et al* [23] pour illustrer nos propos.

On s'intéresse ici au transport de la fraction de volume filtrée. Dans tous les cas l'équation que les auteurs cherchent à résoudre pour respecter le formalisme VOF est la suivante :

$$\frac{\partial \overline{\Phi}_l}{\partial t} + \frac{\partial \overline{u}_i \overline{\Phi}_l}{\partial x_i} = 0 . \quad (2.41)$$

Les auteurs conviennent qu'ils négligent un terme de sous maille, à savoir $\partial(\overline{u}_i \overline{\Phi}_l - \overline{u}_i \overline{\Phi}_l)/\partial x_i$, soulignant qu'il peut être vu comme un terme de « diffusion » de l'interface à l'échelle de la maille LES et que sa contribution doit être infime vu le raffinement relativement fin du maillage. Ce faisant, la taille minimale des structures liquides résolues est de l'ordre de la taille de la maille LES, par construction de l'interface avec la méthode VOF/PLIC. Tous ces auteurs notent donc ici une limitation liée à la méthode de suivi d'interface car les résultats sont dépendants du taux de raffinement du maillage utilisé.

La masse volumique, $\overline{\rho}$, et la viscosité $\overline{\mu}$ sont obtenues à partir de la fonction VOF de la manière suivante :

$$\overline{\rho} = \overline{\Phi}_l \rho_l + (1 - \overline{\Phi}_l) \rho_g , \quad (2.42)$$

$$\overline{\mu} = \overline{\Phi}_l \mu_l + (1 - \overline{\Phi}_l) \mu_g . \quad (2.43)$$

Enfin, la force de tension surface est donnée par la méthode CSF (*Continuum Surface Force*) de Brackbill *et al* [13]. Cette méthode permet d'exprimer la force de tension de surface, $\vec{F}_\sigma$, comme une force volumique agissant au sein des cellules qui contiennent l'interface. L'expression de sa composante dans la direction i est donnée par :

$$F_{\sigma_i} \simeq \sigma \overline{\kappa} \frac{\partial \overline{\Phi}_l}{\partial x_i} \quad \text{avec} \quad \overline{\kappa} = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \overline{\Phi}_l}{|\nabla \overline{\Phi}_l|} \right) . \quad (2.44)$$

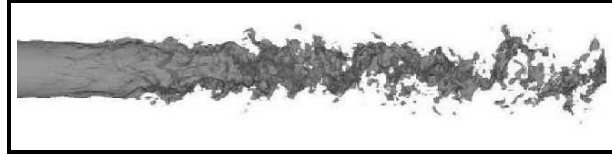
Ici, cette $\vec{F}_\sigma$ exprime, en fait, la force de tension de surface résolue puisqu'elle fait intervenir $\overline{\Phi}_l$ et la courbure de l'interface aux grandes échelles. Ainsi, l'effet de la tension de surface de sous maille, qui apparait dans l'équation de transport de la quantité de mouvement filtrée, est donc également négligé. De Villiers *et al* [23] considèrent que cela est possible compte tenu que l'effet de la tension de surface est vraisemblablement négligeable devant les forces d'inertie ($We \gg 1$).

Notons qu'en pratique, la méthode de suivi d'interface impose une force de tension de surface « numérique » qui prévient la brisure des gouttes plus petites que quelques Δ_x .

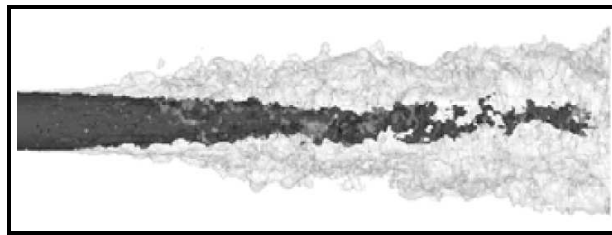
La figure 2.6(a) montre la visualisation du jet d'atomisation obtenue par De Villiers *et al* [23]. L'iso-surface correspondant à $\overline{\Phi}_l = 0.9$ est représentée. Les auteurs notent que, malgré les limitations dues au maillage, la simulation semble à même de bien capter les instabilités de la colonne liquide et ainsi le développement d'ondes de surface telle que celles raccordées au mécanisme de Kelvin-Helmoltz. Il en va de même pour les résultats de Buonfiglioli *et al* [14] présentés sur la figure 2.6(b) où sont représentées les iso-surfaces de fraction de volume $\overline{\Phi}_l = 0.99$ en noir et $\overline{\Phi}_l = 0.01$ en plus clair.

Ces résultats sont à mettre en relation avec ceux obtenus avec le formalisme DNS (c.f. figure 2.2). Les déformations de la colonne liquide, tout proche de l'injecteur, semblent être captées par le maillage LES. Plus loin cependant, la présence d'une myriade de

gouttes fines, visible en DNS, n'est pas détectée, on a plutôt à faire à des « paquets liquides » (ou « blobs ») qui doivent, selon toute vraisemblance, être dus à la méthode de suivi d'interface qui contraint les dimensions spatiales de ces structures à rester de l'ordre de la maille



(a) Résultats de De Villiers *et al* [23].



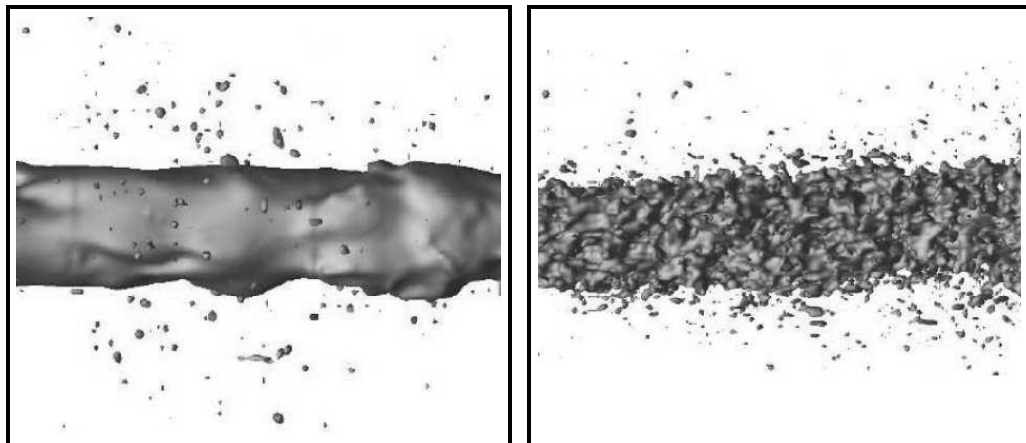
(b) Résultats de Buonfiglioli *et al* [14].

FIGURE 2.6 – Exemples de résultats obtenus en LES d'atomisation primaire pour des jets Diesel.

Sur la figure 2.7 on peut voir l'interface liquide/gaz sur les 500 premiers μm des injections obtenues par Bianchi *et al* [39], avec en (a) le cas laminaire et en (b) le cas turbulent. Ici les auteurs ont choisi de représenter l'iso-surface $\Phi_l = 0.8$, visible en gris. Dans le cas laminaire on peut observer que la colonne liquide subit une instabilité de l'interface de type Rayleigh-Taylor. On peut également observer la présence de quelques gouttes autour de celle-ci. Pour le cas turbulent, l'interface liquide/gaz est beaucoup plus perturbée et on détecte la présence de beaucoup plus de gouttes. Les auteurs notent également que des mécanismes de rupture de filaments sont parfois observés (de type Rayleigh *breakup*) ce qu'ils comparent, de façon qualitative, aux images expérimentales obtenues par Sallam *et al* [111], les cas étudiés n'étant toutefois pas similaires. Bianchi *et al* [39] obtiennent une meilleure description des structures liquides que De Villiers *et al* [23] du fait même que leurs mailles de calcul sont plus petites et donc décrivent naturellement plus d'échelles. Néanmoins, les auteurs insistent également sur le fait que ce maillage est limitant, ayant $\Delta_x^{min} \simeq 4\mu m$, ils estiment que la taille minimale des gouttes accessible avec la méthode VOF équivaut à au moins trois fois Δ_x^{min} , soit $12\mu m$.

Malgré la dépendance des résultats vis-à-vis du taux de raffinement du maillage LES, De Villiers *et al* [23], Buonfiglioli *et al* [14] et Bianchi *et al* [39] arrivent sensiblement aux mêmes conclusions concernant l'utilisation de la méthode LES/VOF pour résoudre l'atomisation primaire d'un jet liquide.

- Les perturbations visibles à la surface du jet sont initiées par la turbulence et le formalisme LES semble à même d'en rendre compte.



(a) Interface liquide/gaz, cas laminaire.

(b) Interface liquide/gaz, cas turbulent.

FIGURE 2.7 – Interface liquide/gaz sur les 500 premiers μm d’une injection primaire simulée en LES. Résultats issus des travaux de Bianchi *et al* [39].

- Ces instabilités de surface ont un taux d’accroissement rapide et mènent à l’apparition d’ondes de surface qui déforment l’interface liquide/gaz.
- Quelques processus à l’origine de la formation de gouttes peuvent ainsi être capturés, du type Rayleigh-Taylor et rupture de filament.
- Les statistiques globales du spray (*e.g.* angle d’ouverture, longueur de pénétration du jet) sont en bon accord avec les quelques résultats expérimentaux disponibles pour ce type d’écoulement.

Au final, De Villiers *et al* [23] notent qu’il convient d’explorer plus en profondeur l’effet de la résolution du maillage mais que néanmoins, la majorité des mécanismes à l’origine de l’atomisation semblent être correctement capturés par le formalisme LES.

2.3 Bilan et conclusions sur les approches antérieures

Dans ce chapitre nous avons détaillé quelques approches antérieures qui nous semblent représentatives du paysage actuel dans le cadre de l’atomisation primaire d’un jet liquide. Et ce, dans les différents formalismes envisageables à l’heure actuelle, c’est-à-dire DNS, RANS puis LES. À la lumière des différentes informations recueillies dans la littérature, il est dorénavant possible d’exprimer relativement clairement les atouts/inconvénients de chaque méthodes et en quoi la simulation aux grandes échelles permet d’envisager des avancées notables pour simuler ce type d’écoulement liquide/gaz.

- En DNS la principale difficulté réside, pour les écoulements liquide/gaz, dans la méthode de suivi d’interface. Moyennant un effort particulier en ce sens, ce formalisme conserve alors le grand avantage de ne pas requérir de modélisation dans la mesure où toutes les échelles de l’écoulement sont résolues, à la fois d’un point

de vu temporel et spatial. Néanmoins, cet avantage se paye, comme on l'a vu, au prix d'un coût de calcul conséquent, voir impraticable, pour certaines applications, à mesure que la géométrie se complexifie ou que l'on augmente le nombre de Reynolds de l'écoulement étudié. D'autant que l'atomisation d'un jet liquide est un écoulement particulièrement contraignant, considérant le phénomène de turbulence d'une part. Et d'autre part, le fait que la fragmentation de ce jet génère des structures liquides, filaments et gouttes, dont les dimensions spatiales sont très petites.

Cependant, face au manque de données expérimentales, les DNS d'atomisations primaires, telle que celle conduite par Menard *et al* [90, 91], peuvent avoir valeur de point de comparaison pour la validation des modèles développés sur des cas simples.

- Tous les modèles RANS présentés ici disposent d'un domaine de validité dans lequel les résultats sont en bon accord l'expérimental. C'est d'ailleurs à partir de l'expérience qu'Elkotb [29] et Hiroyasu *et al* [43] obtiennent des corrélations permettant de trouver le diamètre moyen de Sauter. Cependant, il est difficile de distinguer dans ces corrélations l'influence des phénomènes physiques, et ces relations ont un domaine de validité assez réduits.

Les modèles « WAVE » et « ELSA » proposent, chacun à leur manière, d'obtenir des tailles de gouttes tout en prenant en compte la zone primaire d'atomisation. Néanmoins, un des aspects notable des modèles présentés ici est que dans la plupart on « choisi », en quelque sorte, en fonction de l'injecteur, quel est le phénomène physique prépondérant qui pilote l'atomisation primaire. Ainsi le modèle « WAVE » fait le choix de considérer que les instabilités de Kelvin-Helmoltz sont à l'origine du fractionnement primaire et le modèle « ELSA » attribue un rôle majeur au phénomène de turbulence. Ceci peut nécessiter des adaptations en fonction de la géométrie ou du type d'injecteur. C'est ce qu'ont proposé Patterson *et al* [97] en ajoutant la prise en compte de l'instabilité de Rayleigh-Taylor dans le modèle « WAVE ». Pour le modèle « ELSA », Lebas [65] montre que la fermeture au premier ordre du flux turbulent (c.f. équation 2.38) semble suffisante dans le cas de jets ronds mais Demoulin *et al* [26] montrent que celle-ci doit être adaptée dans le cas d'injecteurs coaxiaux et qu'il est nécessaire de prendre en compte les instabilités de Rayleigh-Taylor dans cette fermeture afin d'obtenir une pénétration moyenne de liquide comparable à l'expérience. Des modifications conséquentes sont donc souvent nécessaires afin d'obtenir de bons résultats d'un cas à un autre.

- L'utilisation de la LES pour résoudre un écoulement d'atomisation primaire est relativement récente. Une des premières étapes a donc, tout logiquement, consisté à utiliser les modèles de suivi d'interface issus de la DNS et les modélisations standards de la turbulence, développées dans le cadre monophasique pour ce formalisme. Ce que De Villiers *et al* [23] ont proposé dès 2003 avec la méthode VOF/LES sur un cas d'injection de type Diesel. Les différentes études menées confirment le potentiel de la LES à rendre compte des premières instabilités de surface de la colonne liquide dont les perturbations sont initiées par la turbulence en sortie d'injecteur. Cependant, cette méthode LES/VOF revient à réaliser un

suivi d'interface totalement identique à la méthode VOF en DNS en transportant le champ de fraction de volume au niveau des échelles résolues. Cela pose clairement problème pour décrire les structures liquides dont au moins une dimension spatiale est inférieure à la taille de la maille LES. En fait, ce point constitue clairement une modélisation, dans la mesure où la description du spray en sous maille est clairement empêchée par la méthode de suivi d'interface et peut, à terme, influencer sur les résultats obtenus (cet effet sera caractérisé au tout début du chapitre 4).

Au final, et compte tenu des limitations évoquées dans ce chapitre pour les formalismes DNS et RANS, la LES apparaît comme une alternative intéressante pour la résolution des écoulements en régime d'atomisation. En effet, les hypothèses sur lesquelles est basé ce formalisme permettent d'espérer pouvoir décrire les instabilités aux grandes échelles de l'interface liquide/gaz. Et ce, dans la mesure où plus de physique est résolue, permettant ainsi de baisser la contribution des modèles par rapport à l'approche RANS tout en garantissant des temps de restitution plus courts que la DNS. L'universalité des modèles est également importante. De ce point de vue, on peut espérer que les modèles d'atomisation en LES vont apporter des améliorations et une certaine adaptabilité, face aux nombreuses configurations et géométries d'injecteurs que l'on peut rencontrer. Cependant, comme on l'a vu, l'utilisation de ce formalisme pour résoudre l'atomisation primaire est encore rare. Le domaine est encore largement inexploré et nécessite des développements importants. En outre, des questions se posent sur la nature de l'interaction de l'interface avec la turbulence, sur la description du spray en sous maille ou encore sur le type de modélisations spécifiques aux écoulements liquide/gaz. Le chapitre suivant propose donc d'explorer certaines de ces interrogations en détaillant plus formellement les équations de bilan en LES, en étudiant le comportement théorique des termes à modéliser lors d'analyses *a priori* de calculs DNS.

Chapitre 3

Simulation aux grandes échelles : modélisations et tests de sous maille

CE CHAPITRE est consacré à l’aspect simulation aux grandes échelles. Dans un premier temps, on rappellera les bases et les idées sur lesquelles se fonde ce formalisme. Le filtrage des équations monophasiques va permettre de mettre en évidence les termes de sous maille non fermés inhérents à la simulation aux grandes échelles. L’extension à un écoulement à plusieurs phases amène de nouvelles problématiques bien particulières, notamment dues aux sauts de grandeurs physiques à travers l’interface et le traitement spécifique de cette dernière. Enfin, l’étude des termes de sous maille à partir d’une DNS va permettre de quantifier leur importance relative d’une part, de proposer des fermetures et de tester leur pertinence d’autre part.

3.1 Introduction

En premier lieu, notons qu’afin de mentionner le formalisme des grandes échelles l’acronyme anglais « LES » (pour *Large Eddy Simulation*) sera souvent utilisé. Ainsi, les mentions « simulation aux grandes échelles » et LES seront absolument équivalentes dans ce mémoire. De la même manière, les contributions de sous maille seront parfois indicées « SGS » pour *subgrid scale*. Après avoir introduit les notions de base de ce formalisme, assez d’éléments seront réunis pour discuter d’une manière générale de son intérêt dans le cadre des écoulements de type atomisation.

3.1.1 Généralités sur la LES

Les bases de la LES ont été posées il y a une quarantaine d’années, avec notamment les travaux précurseurs de Smagorinsky [120]. Initialement développée pour les écoulements atmosphériques, la simulation aux grandes échelles n’a cessé d’être étendue à différents types d’écoulements et les modélisations ont fait l’objet de nombreuses améliorations. La simulation aux grandes échelles est basée sur l’hypothèse de la cascade énergétique de Kolmogorov [58]. Elle stipule que la production d’énergie turbulente est contrôlée par les grandes structures de l’écoulement, alors que la dissipation de cette énergie est assurée par les plus petites structures. Elle se produit de façon

isotrope et universelle indépendamment du type d'écoulement. D'un point de vue spectral, cela revient à dire que les basses fréquences contiennent l'énergie alors que les hautes fréquences dissipent celle-ci. Une représentation classique du spectre d'énergie turbulente est présenté sur la figure 3.1 (a) en échelle $\log/\log$. Schématiquement, c'est le spectre obtenu pour une turbulence homogène isotrope : on trace l'énergie turbulente E en fonction du nombre d'onde k . La production d'énergie a lieu dans les bas nombres d'onde puis est dissipée vers les hautes fréquences à travers une zone inertielle indépendante du type d'écoulement et où E est proportionnel à $k^{-5/3}$.

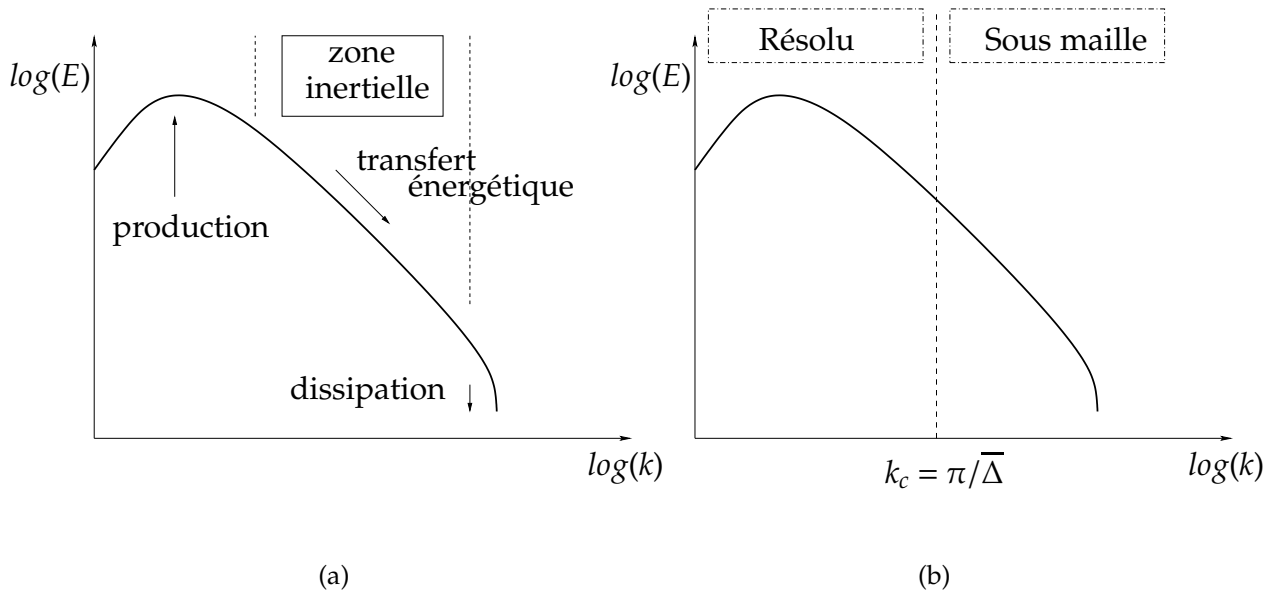


FIGURE 3.1 – Spectre de l'énergie cinétique turbulente.

On introduit alors la notion de séparation d'échelles en LES. En effet, partant de l'hypothèse de Kolmogorov, l'idée est de ne calculer effectivement que les échelles supérieures à une longueur $\bar{\Delta}$, appelée échelle de coupure, et de modéliser l'effet des plus petites échelles à travers des termes dits de « sous maille ». L'échelle de coupure est intrinsèquement liée à la taille de la maille LES. Sur le maillage LES, on ne résout, pour un champ hydrodynamique Φ , que la partie résolue $\bar{\Phi}$. Et on définira $\Phi' = \Phi - \bar{\Phi}$ comme étant un terme de sous maille. Ces termes, dans l'idéal, rendent compte de l'interaction des plus petites échelles de l'écoulement avec celles effectivement résolues. Cette séparation est représentée sur la figure 3.1 (b) où l'on a défini la fréquence de coupure $k_c = \pi/\bar{\Delta}$. Néanmoins, comme on peut le comprendre sur cette figure, il convient d'être prudent sur le choix de k_c et de « couper » dans la zone inertielle. En effet, si k_c est trop faible le risque est de sortir de la zone inertielle et par conséquent de perdre l'isotropie et la validité des modèles. *A contrario*, on peut remarquer que si l'on décide de couper de plus en plus haut dans le spectre alors on résout de plus en plus d'échelles. Ceci revient à dire que la LES tend vers un résultat du type des simulations numériques directes à mesure que l'on augmente la fréquence de coupure, la contribution des termes de sous maille devenant alors de plus en plus faible.

Afin d'établir les équations résolues en LES, on utilise la notion de filtrage. En effet, appliquer un filtre passe bas permet de conserver les informations sur les basses fréquences tout en gommant les petites échelles. En pratique, la notion de filtre est implicitement reliée à la taille des mailles LES, c'est-à-dire l'échelle résolue. La LES peut alors être vue comme une DNS filtrée à laquelle il faut donc ajouter les contributions de sous-maille.

3.1.2 Intérêts de la simulation aux grandes échelles

A ce point, nous avons introduit les idées générales qui sous-tendent le formalisme LES. C'est-à-dire la notion de séparation d'échelle qui va permettre de résoudre seulement les grandes échelles, d'un écoulement permettant de réduire notablement la taille du maillage par rapport à une résolution numérique directe résolvant toutes les échelles de la turbulence. Dans ce paragraphe on se propose de discuter brièvement des avantages et des inconvénients de cette méthode. En effet, face à l'apport relativement récent des simulations numériques directes, il se pose la question légitime de l'intérêt global de la LES. Avant même de discuter des implications qu'induisent la considération d'un écoulement diphasique sur ce type de simulation, on peut dresser une liste non exhaustive des différents avantages et inconvénients du formalisme LES.

Avantages :

- Avec la LES seules, les petites échelles requièrent une modélisation. Considérant la dynamique « universelle » de ces petites échelles, on peut attendre des modélisations qu'elles soient relativement simples (comparées aux méthodes RANS) et permettent à la LES de résoudre une grande variété d'écoulements.
- Coût numérique inférieur à la DNS. En pratique, seules les échelles supérieures à $\bar{\Delta}$ requièrent un traitement numérique spécifique (*i.e.* grille de résolution), puisque ce sont les seules effectivement résolues. Dans le cas d'un maillage cartésien, par exemple, cela revient à utiliser $\Delta_{LES} \simeq \bar{\Delta} > \Delta_{DNS}$, avec Δ_{LES} et Δ_{DNS} les tailles des mailles LES et DNS respectivement. Ceci laisse envisager une réduction effective des coûts numériques, notamment au regard de la taille mémoire ou encore de la condition CFL ¹ [22, 44].
- Possibilité de simuler des écoulements instationnaires avec des géométries complexes.
- Contrairement au formalisme RANS, où l'on simule des équations qui ont été moyennées, la LES, tout comme la DNS, simule des équations instantanées dont les résultats sont moyennés après. Donc, une réduction de l'échelle de coupure garantie de tendre vers des résultats DNS et donc de tendre vers des résultats que l'on peut considérer comme exacts.

1. Condition de Courant-Friedrichs-Lewy, impose pour un calcul stable que la propagation d'une onde durant un pas de temps Δt doit être inférieure à la taille de la maille de calcul.

Inconvénients

- Le formalisme LES impose une certaine indépendance des petites structures vis-à-vis de la géométrie de l'écoulement, ce qui peut devenir un problème en proche paroi où une couche limite apparaît. Sans modélisation, la résolution de l'écoulement dans cette zone peut nécessiter d'affiner la grille de résolution dans la mesure où cette couche limite contient les plus petites échelles turbulentes de l'écoulement. On perd alors dans ce cas l'un des intérêts principal de la LES.
- Même si le coût numérique de la LES est plus faible qu'en DNS, il reste relativement élevé pour nombre d'applications industrielles.
- La LES nécessite encore de nombreux développements pour simuler des écoulements complexes qui contiennent des discontinuités. On pense notamment aux ondes de choc, aux flammes et bien sûr aux écoulements diphasiques.

Le travail réalisé durant cette thèse se consacre à ce dernier point. Il est d'usage de représenter les différents types de modélisations sur un diagramme complexité/résolution, figure 3.2, où la LES se situe à mi-chemin entre la DNS qui permet d'atteindre un haut niveau de résolution mais dont la complexité est limitée et la modélisation RANS qui permet de simuler des écoulements et des géométries plus complexes mais où l'effort de modélisation est important. De plus, le formalisme RANS ne permet pas de capturer tous les phénomènes que peut capturer la LES, notamment au niveau des phénomènes instationnaires. Ainsi, sur ce graphique les résultats des différentes analyses que nous allons présenter dans ce chapitre se situent au niveau de la flèche pointillée, où les travaux DNS vont nous aider à valider le développement d'un modèle LES spécifiquement dédié à l'atomisation liquide/gaz.

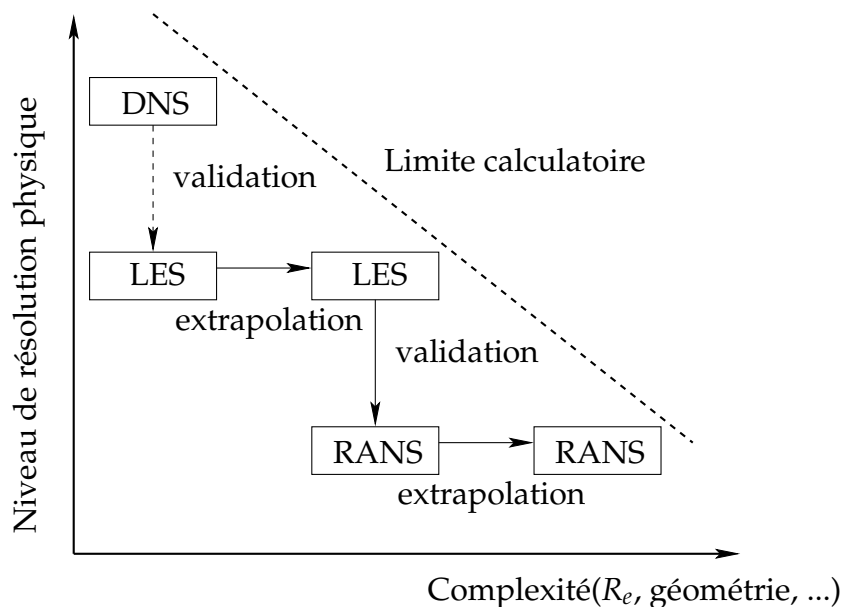


FIGURE 3.2 – Schématisation des relations entre les différents formalismes DNS, LES et RANS en terme de complexité des cas de calcul face au niveau de résolution.

3.2 Opération de filtrage en LES

Mathématiquement, l'opération de filtrage utilisée en LES est une convolution spatiale qui peut être vue comme une moyenne locale pondérée. Dans l'idéal, cette opération sur un champ turbulent ne devrait pas impacter les grandes structures de l'écoulement tandis-que les phénomènes à plus petites échelles ($< \bar{\Delta}$) disparaissent. Ceci est illustré sur la figure 3.3 où un signal quelconque f est filtré avec 2 échelles de coupure différentes. On peut clairement voir le lissage provoqué par l'opération de filtrage, d'autant plus prononcé que $\bar{\Delta}$ est grand.

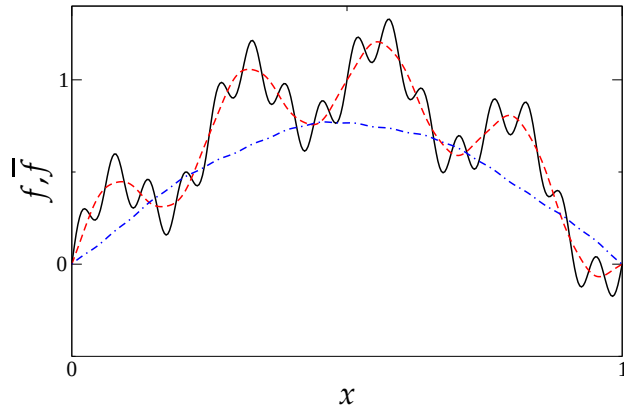


FIGURE 3.3 – Le signal f (ligne pleine) est filtré, avec les longueurs de coupure $\bar{\Delta}_1$ (tiret) et $\bar{\Delta}_2$ (tiret-point) telles que $\bar{\Delta}_1 < \bar{\Delta}_2$.

On détaille dans la suite l'expression mathématique de la convolution, ainsi que les filtres fréquemment utilisés en LES.

3.2.1 Définition de la convolution en une dimension

On peut donner une définition générale monodimensionnelle de la convolution. L'expression de la variable f quelconque filtrée dans l'espace physique est :

$$\bar{f}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} G(\bar{\Delta}, x - x') f(x') dx' = G \star f . \quad (3.1)$$

L'écriture $\bar{(\bullet)}$ indique que la fonction entre parenthèses est filtrée et l'opérateur $\star$ représente l'opération de convolution. Nous avons introduit le noyau de convolution G et $\bar{\Delta}$ la longueur de coupure du filtre. La distinction entre la partie résolue de l'écoulement et celle non résolue dépend alors de cette échelle de coupure locale $\bar{\Delta}$. Les fluctuations d'un champ hydrodynamique quelconque f se trouvant en dessous de $\bar{\Delta}$ sont dites de sous maille. *A contrario*, les fluctuations supérieures à cette échelle sont dites résolues.

Afin que le filtrage soit une opération linéaire il est nécessaire d'avoir la normalisation suivante :

$$\int_{-\infty}^{\infty} G(\bar{\Delta}, x - x') dx' = 1 . \quad (3.2)$$

Cette relation assure que si f est une constante alors elle est invariante par filtrage. On peut exprimer la partie non résolue, f' , d'un champ local instantané en utilisant la décomposition suivante :

$$f' = f - \bar{f} = (1 - G) \star f . \quad (3.3)$$

f' est également appelée fluctuation de sous maille par analogie avec la décomposition de Reynolds. Elle correspond aux variations de f dont les échelles sont inférieures à $\bar{\Delta}$.

3.2.2 Propriétés du filtre

L'opération de filtrage possède quelques propriétés identiques à l'opération moyenne d'ensemble. Notamment, la linéarité du filtre permet d'écrire avec A une constante, f et g deux variables :

$$\overline{Af + g} = A\bar{f} + \bar{g} . \quad (3.4)$$

Par contre, de manière générale un filtre ne respecte pas la propriété dite d'idempotence (exception faite de quelques filtres), telle que :

$$\overline{\bar{f}g} \neq \bar{f}\bar{g} . \quad (3.5)$$

Il en découle directement :

$$\overline{\bar{f}} \neq \bar{f} , \quad (3.6)$$

et notamment sur les fluctuations de sous maille :

$$\overline{f'} \neq 0 . \quad (3.7)$$

3.2.3 Filtrage dans l'espace spectral

On peut également définir l'opération de filtrage dans l'espace spectral, la convolution se réduisant alors à un produit dans cet espace :

$$\check{\bar{f}}(k) = \check{f}(k)\check{G}(\bar{\Delta}, k) , \quad (3.8)$$

avec $\check{f}(k)$ la transformée de Fourier de la fonction f . Même si, de manière générale, ce type de filtrage sert principalement dans les solveurs spectraux, ou encore sur des maillages périodiques, il permet de bien comprendre comment doit se comporter le filtre en LES.

Effectivement, en 1 dimension $\check{G}(\bar{\Delta}, k)$ s'exprime sous la forme :

$$\check{G}(\bar{\Delta}, k) = \int_{-\infty}^{\infty} G(\bar{\Delta}, x) e^{-ikx} dx . \quad (3.9)$$

La normalisation est respectée puisque $\check{G}(0, \bar{\Delta}) = 1$. Si on considère un signal u périodique avec une période 1, on a dans l'espace physique :

$$u(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k e^{2\pi i k x} , \quad (3.10)$$

ce qui conduit directement pour $\bar{u}(x)$ à :

$$\bar{u}(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left(\check{G}(\bar{\Delta}, k) c_k \right) e^{2\pi i k x} . \quad (3.11)$$

On comprend d'après l'équation 3.11 que pour que les petites échelles soit atténuées, on doit avoir $|\check{G}(\bar{\Delta}, k)| \ll 1$ lorsque k devient grand. L'opération de filtrage en LES doit donc effectivement être un filtre passe-bas.

3.2.4 Erreur de commutation

Il est un point important que l'on peut noter qui concerne l'erreur dite de « commutation ». En pratique, puisque le filtrage est implicite en LES, c'est-à-dire que l'on considère ne résoudre que les variables filtrées, on utilise généralement la longueur de coupure suivante en 3 dimensions :

$$\bar{\Delta} \simeq (\Delta_x \Delta_y \Delta_z)^{1/3} , \quad (3.12)$$

Δ_x , Δ_y et Δ_z étant les tailles des mailles de calcul dans les différentes directions de l'espace. En toute généralité, si l'on considère un écoulement doté d'une géométrie complexe, $\bar{\Delta}$ peut alors varier spatialement et temporellement. Ceci peut induire une erreur de commutation entre l'opérateur de filtrage et l'opérateur de dérivation, la longueur de coupure n'étant ni homogène ni isotrope. Ce que montrent par exemple Leonard *et al* [72] en utilisant un filtre variant temporellement. Cela revient à écrire pour un champ u variant dans une dimension spatiale :

$$\overline{\frac{\partial u(x)}{\partial x}} - \frac{\partial \bar{u}(x)}{\partial x} \neq 0 . \quad (3.13)$$

Il est possible d'expliciter cette erreur. Prenons le cas très général où l'on définit le filtrage de la variable $u(x)$ comme suit :

$$\bar{u}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x, x') u(x') dx' . \quad (3.14)$$

Formellement, si on applique l'opération 3.14 sur la dérivée de $u(x)$ on obtient :

$$\overline{\frac{\partial u(x)}{\partial x}} = \int_{-\infty}^{\infty} G(x, x') \frac{\partial u(x')}{\partial x} dx' = [G(x, x') u(x')]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial G(x, x')}{\partial x'} u(x') dx' , \quad (3.15)$$

après intégration par partie. La condition de normalisation 3.2 indique nécessairement que le noyau $G \rightarrow 0$ quand $|x'| \rightarrow \infty$. Par conséquent, le premier terme du membre de droite de l'équation 3.15 est nul. Avec l'expression de $\partial \bar{u} / \partial x$ on peut alors exprimer l'erreur de commutation :

$$\frac{\overline{\partial u(x)}}{\partial x} - \frac{\partial \bar{u}(x)}{\partial x} = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial G}{\partial x'} - \frac{\partial G}{\partial x} \right) u(x') dx' . \quad (3.16)$$

Sous la condition que le filtre s'exprime comme une convolution, avec son noyau G tel que $G(x, x') = F(x - x')$, on peut montrer que cette erreur est nulle. En pratique, nous considérerons toujours être dans ce cas. En outre, l'utilisation d'un noyau à support compact dans l'espace physique, ainsi que des longueurs de coupure $\bar{\Delta}$ constantes spatialement et temporellement assurera la commutativité des opérateurs de filtrage et de dérivation.

3.2.5 Filtrage dans plusieurs dimensions

La convolution en 3 dimensions s'exprime de la manière suivante :

$$\bar{f}(x, y, z) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} G(\bar{\Delta}, x - x', y - y', z - z') f(x', y', z') dx' dy' dz' . \quad (3.17)$$

Si on considère que le filtrage peut se définir indépendamment des directions de l'espace, on peut décomposer $G(x, y, z)$ à partir de 3 filtres monodimensionnels, $G_i(x_i)$ dans la direction i , tel que :

$$G(\bar{\Delta}, x, y, z) = G_x(\bar{\Delta}, x) G_y(\bar{\Delta}, y) G_z(\bar{\Delta}, z) . \quad (3.18)$$

La formulation 3.17 devient alors équivalente à :

$$\bar{f}(x, y, z) = \int_{-\infty}^{\infty} G_z(\bar{\Delta}, z - z') \left(\int_{-\infty}^{\infty} G_y(\bar{\Delta}, y - y') \left(\int_{-\infty}^{\infty} G_x(\bar{\Delta}, x - x') f(x', y', z') dx' \right) dy' \right) dz' . \quad (3.19)$$

Cette formulation revient donc à appliquer successivement le filtre monodimensionnel (équation 3.1) avec le résultat du filtrage obtenu dans la direction précédente, l'ordre des directions n'ayant pas d'incidence. On s'appliquera donc dans la suite à décrire les filtres monodimensionnels les plus fréquemment utilisés.

3.2.6 Quelques exemples de filtres

Il existe tout un panel de filtres [109, 37], à la fois dans l'espace physique et spectral. On décrit ici 3 types de filtres couramment utilisés. Ces 3 filtres sont simples, symétriques et possèdent la même taille caractéristique $\bar{\Delta}$. On applique ces filtres à une fonction créneau Φ , gardant à l'esprit que ce type de fonction peut aussi représenter une fonction indicatrice de phase.

3.2.6.1 Le filtre porte

Ce filtre est une moyenne locale sur la taille du filtre, $\bar{\Delta}$. L'expression du noyau de convolution est :

$$G(\bar{\Delta}, x) = \begin{cases} 1/\bar{\Delta} & \text{si } |x| < \bar{\Delta}/2 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.20)$$

Dans l'espace spectral sa fonction de transfert est :

$$\check{G}(\bar{\Delta}, k) = \frac{\sin(k\bar{\Delta}/2)}{k\bar{\Delta}/2} \quad (3.21)$$

Les fonctions G et $\check{G}$ sont représentées sur les figures 3.4(a) et (b), respectivement. Ce filtre est à support compact dans l'espace physique et non compact dans l'espace spectral. On peut observer sur la figure 3.4(c) que l'application sur la fonction Φ fait varier $\bar{\Phi}$ de façon linéaire sur la largeur $\bar{\Delta}$ en 0.

3.2.6.2 Le filtre Gaussien

Ce filtre peut également être vu comme une moyenne locale mais pondérée par la distance au point considéré. Le noyau s'écrit :

$$G(\bar{\Delta}, x) = \sqrt{\frac{\gamma}{\pi\bar{\Delta}^2}} \exp\left(\frac{-\gamma x^2}{\bar{\Delta}^2}\right) \quad (3.22)$$

où γ est une constante de normalisation. Sa fonction de transfert est alors :

$$\check{G}(\bar{\Delta}, k) = \exp\left(\frac{-\bar{\Delta}^2 k^2}{4\gamma}\right) \quad (3.23)$$

Comme on peut l'observer sur les figures 3.5(a) et (b), le filtre Gaussien garde la même forme dans l'espace physique et spectral. Ce qui n'est pas le cas des 2 autres filtres qui présentent des oscillations négatives. Cependant ce filtre est à support non local dans les 2 espaces. Sur la figure 3.5(c), la variation en 0 de $\bar{\Phi}$ se fait toujours sur l'épaisseur $\bar{\Delta}$, mais n'est plus linéaire.

3.2.6.3 Le filtre passe bas

L'utilisation de ce filtre se fait principalement dans des formalismes utilisant des méthodes spectrales ou des maillages périodiques. Son noyau de convolution $\check{G}$ est compact dans l'espace spectral et non compact dans l'espace physique :

$$\check{G}(\bar{\Delta}, k) = \begin{cases} 1/\bar{\Delta} & \text{si } k < k_c \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.24)$$

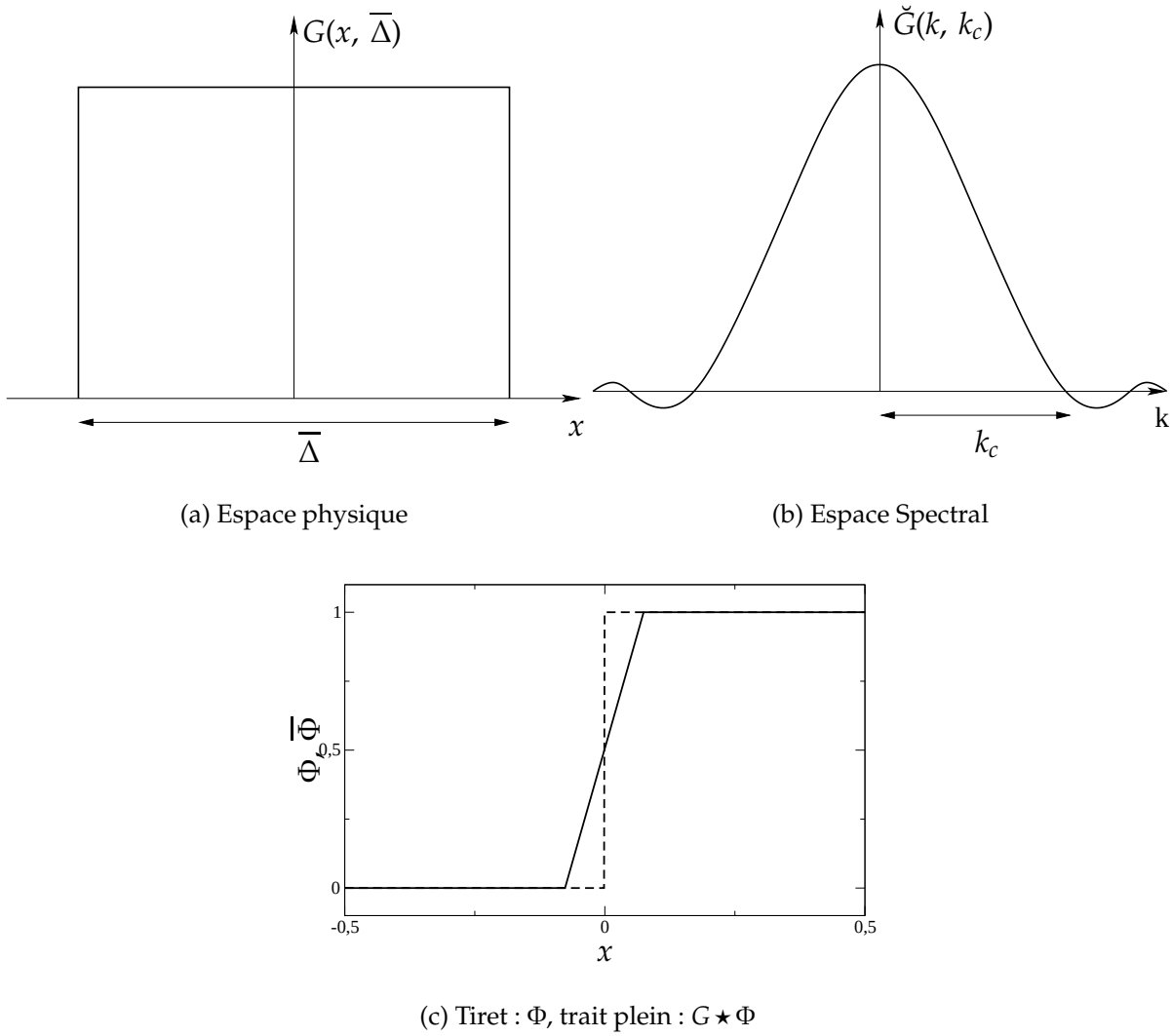


FIGURE 3.4 – Filtre porte ou top-hat dans l’espace physique (a) et spectral (b). Application de $G \star \Phi$ sur la fonction indicatrice de phase (c).

G s’exprime alors dans l’espace physique par :

$$G(\bar{\Delta}, x) = \frac{\sin(k_c x)}{\pi x} . \quad (3.25)$$

G et $\check{G}$ sont présentées sur les figures 3.6(a) et (b). Cette fonction n’ayant pas de zéros pour minimum ou maximum dans l’espace physique son application dans cet espace induit donc des oscillations que l’on peut observer sur la figure 3.6(c). Liu *et al* [79] ont montré que ces oscillations ont pour effet de réduire la fiabilité des modèles. *A priori*, son utilisation dans l’espace physique n’est donc pas conseillée.

3.2.7 Aspect numérique du filtrage

Dans la suite des travaux on utilisera un filtre porte sur un maillage cartésien tel que $\Delta x = \Delta y = \Delta z = \Delta$, ce qui simplifie grandement sa discrétisation. En effet, celle-ci

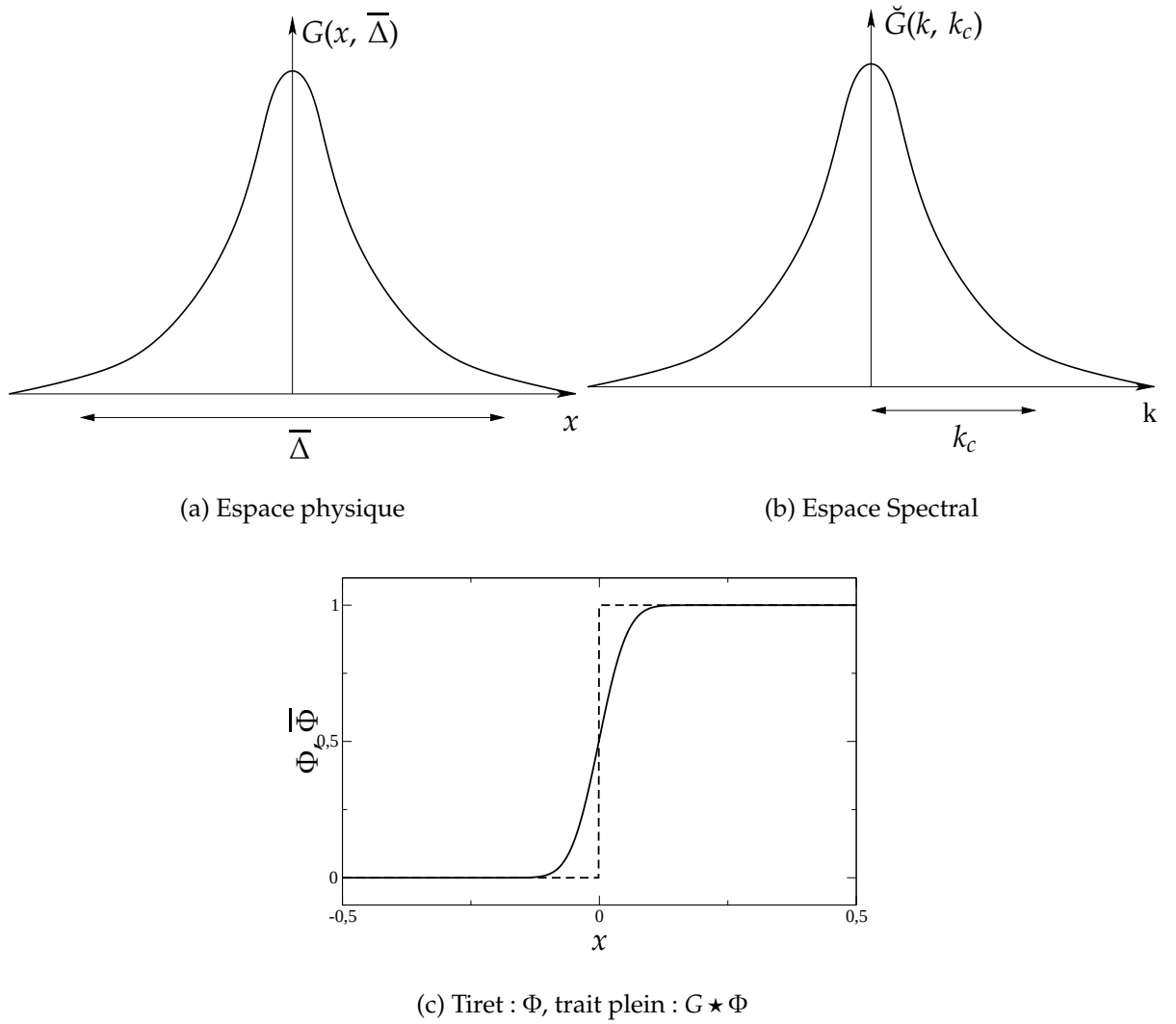


FIGURE 3.5 – Filtre Gaussien dans l'espace physique (a) et spectral (b). Application de $G \star \Phi$ sur la fonction indicatrice de phase (c).

s'écrit :

$$\bar{\Phi}(i, j, k) = \frac{1}{(2N+1)^3} \sum_{n=-N}^N \sum_{m=-N}^N \sum_{l=-N}^N \Phi(i+n, j+m, k+l) , \quad (3.26)$$

avec :

$$2N+1 = \left(\frac{\bar{\Delta}}{\Delta} \right) . \quad (3.27)$$

C'est un filtre standard fréquemment utilisé dans la pratique. L'intérêt de ce filtre est sa simplicité de mise en œuvre compte tenu de la remarque sur l'équation 3.19. Le support du noyau de convolution étant compact, les bornes d'intégration sont clairement définies. Il n'est pas nécessaire de définir une zone d'influence pour ce filtre,

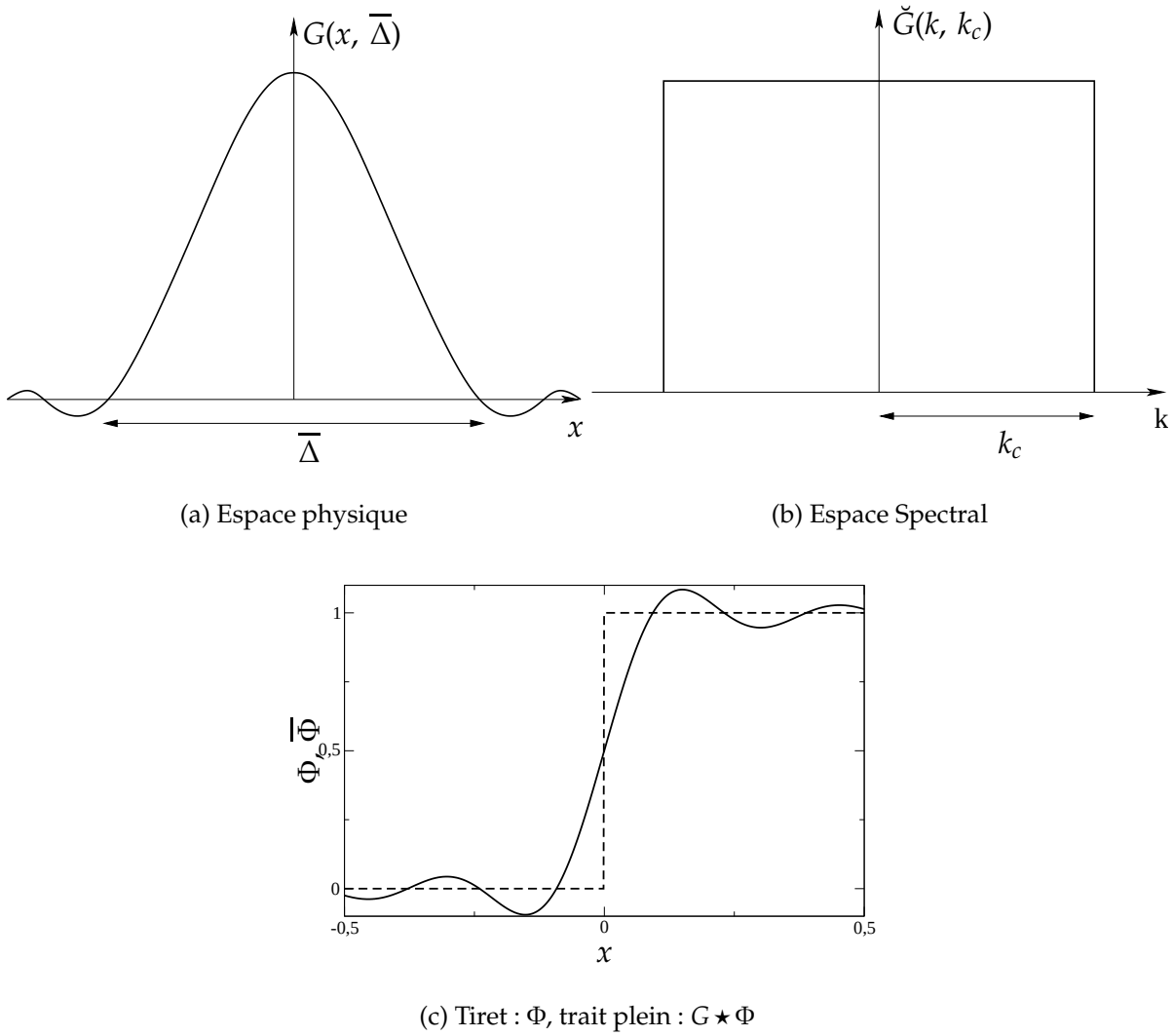


FIGURE 3.6 – Filtre passe bas ou cut-off dans l'espace physique (a) et spectral (b). Application de $G \star \Phi$ sur la fonction indicatrice de phase (c).

ce qui n'est pas le cas du filtre Gaussien, celui-ci ayant un support non local. En outre, ce filtre garantit l'absence d'erreurs de commutation avec un maillage isotrope en espace et en temps. Dans la suite on exprimera souvent la taille du filtre en fonction de Δ comme :

$$\bar{\Delta} = \alpha \Delta , \quad (3.28)$$

avec α un nombre impair.

3.3 Mise en évidence des termes de sous maille

L'application de l'opérateur de filtrage sur les équations de transport fait apparaître des termes non fermés. Ces termes font effectivement, comme nous allons le voir,

intervenir des corrélations entre des variables non filtrées. Historiquement, dans la mesure où la taille du filtre, $\bar{\Delta}$, est la plupart du temps associée à celle des mailles de calcul en LES, ces termes sont dits « de sous maille » afin d'exprimer le fait qu'ils rendent compte de phénomènes dont les échelles spatiales sont inférieures à la grille de résolution. En outre, l'aspect de la LES qui consiste à fermer ces termes par des modèles, est appelé « modélisation de sous maille », ce que l'on abordera d'ailleurs dans la section 3.4.

Dans un premier temps, on applique le filtrage sur les équations de transport monophasiques permettant de mettre en lumière l'apparition des termes de sous maille. Puis on se consacre à un cas à plusieurs phases afin de mettre en lumière les différences avec le cas monophasique et d'exhiber les termes de sous maille spécifiques à ce type d'écoulement

3.3.1 Cas monophasique

Dans un cas monophasique incompressible, sans réaction chimique, l'écoulement est décrit par les équations de Navier-Stokes, qui s'écrivent dans leur forme conservative :

- Conservation de la masse

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 . \quad (3.29)$$

- Quantité de mouvement :

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right) , \quad (3.30)$$

où μ est la viscosité dynamique, constante.

La condition d'incompressibilité donne $\rho = \text{constante}$. Ainsi, tenant compte de l'équation 3.4 sur la linéarité du filtre et considérant que celui-ci commute avec toutes les dérivées (c.f. section 3.2.4), l'application de l'opérateur de filtrage donne pour les 2 équations de transport précédentes, 3.29 et 3.30 :

- Conservation de la masse filtrée :

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 . \quad (3.31)$$

- Quantité de mouvement filtrée :

$$\frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right) . \quad (3.32)$$

Si on définit τ_{ij} tel que :

$$\tau_{ij} = \bar{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j . \quad (3.33)$$

Il est possible de réécrire 3.32 comme :

$$\frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho (\bar{u}_i \bar{u}_j + \tau_{ij})}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right). \quad (3.34)$$

On obtient alors le jeu d'équations qui gouverne $\bar{u}_i ; \{i = 1, 2, 3\}$. Cette décomposition de τ_{ij} permet de se rapprocher de la forme de l'équation 3.30 à la différence près que l'on voit apparaître le terme de sous maille τ_{ij} .

Il est clair qu'il n'est pas possible d'obtenir de façon directe τ_{ij} dans la mesure où son calcul requiert la connaissance simultanée de u_i et $\bar{u}_i ; \{i = 1, 2, 3\}$. Or, en LES la connaissance d'une variable hydrodynamique se limite à sa partie résolue. En conséquence, la résolution de 3.34 va nécessiter un effort de modélisation. Beaucoup d'approches ont été proposées Ceci va faire l'objet d'un développement plus approfondi dans la partie 3.4.

Ainsi, nous avons mis en lumière de manière simple dans un cas incompressible et monophasique le terme de sous maille τ_{ij} lorsque les équations de transport sont filtrées. Il convient maintenant d'appliquer le même formalisme sur les équations décrivant un écoulement à plusieurs phases.

3.3.2 Extension à plusieurs phases

Avant toute chose, il est nécessaire d'établir les équations de transport régissant l'écoulement à plusieurs phases. Nous allons utiliser le formalisme dit monofluide. Ce formalisme permet de condenser le jeu d'équations de transport de chaque phase en un jeu unique décrivant les 2 phases simultanément. En effet, les équations de transport sont identiques dans chaque phase, aux variables physiques près (ρ et μ notamment). On peut alors décrire les 2 phases avec des équations de transport uniques valables pour ces 2 phases simultanément. Il existe néanmoins des relations de saut au niveau de l'interface liquide/gaz qu'il va falloir considérer afin de rendre compte de l'interaction entre les 2 phases. L'utilisation d'une fonction indicatrice de phase χ_k sur tout le domaine de calcul permet de discriminer la phase k et repérer la position de l'interface liquide/gaz.

Le lecteur pourra se référer à [54] pour connaître les origines et le développement de la formulation monofluide.

3.3.2.1 Equations monofluides pour les interfaces non réactives

Nous allons ici établir les équations monofluides. Il convient, dans un premier temps, de préciser les hypothèses physiques et le système de notation utilisé. On considère avoir un écoulement incompressible dans chaque phase. ρ , la masse volumique, ainsi que μ , la viscosité dynamique sont constantes dans chaque phase. On se place dans le cas d'une interface non réactive (pas d'évaporation), il n'y aura donc pas d'échange de masse au niveau de celle-ci.

Sur la figure 3.7 (a) le domaine de calcul Ω est représenté. La phase k évolue sur le domaine Ω_k . Précisément pour notre cas, $k = l$ lorsque qu'il est question du liquide et $k = g$ pour le gaz. L'interface est représentée par la lettre grecque Γ . De façon générale on considèrera que l'interface est un objet de dimension N évoluant dans un espace

de dimension $N + 1$. Sur ce schéma, on a donc à faire à une ligne (en pointillés). Alors qu'en 3 dimensions l'interface est une surface.

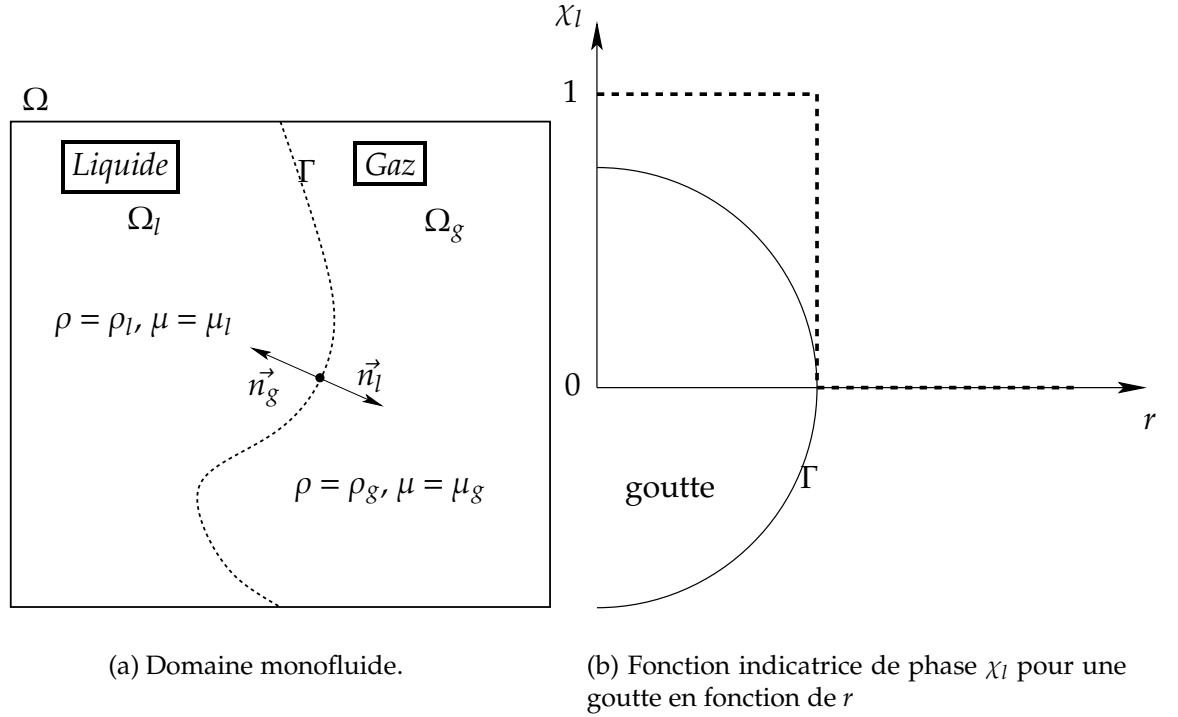


FIGURE 3.7 – Domaine monofluide.

On peut alors écrire les équations de transport de la phase k , valables sur son domaine Ω_k , avec les hypothèses précédemment énoncées.

- Masse :

$$\frac{\partial u_i^k}{\partial x_i} = 0. \quad (3.35)$$

- Quantité de mouvement :

$$\frac{\partial \rho_k u_i^k}{\partial t} + \frac{\partial \rho_k u_i^k u_j^k}{\partial x_j} = -\frac{\partial P_k}{\partial x_i} + \frac{\partial D_{ij}^k}{\partial x_j}, \quad (3.36)$$

avec, D_{ij}^k le tenseur des contraintes visqueuses dans la phase k , défini comme :

$$D_{ij}^k = \mu_k \left(\frac{\partial u_i^k}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j^k}{\partial x_i} \right). \quad (3.37)$$

Dans la suite il va être nécessaire de discriminer la phase dans laquelle on se trouve. On définit alors la fonction indicatrice de phase χ_k sur Ω telle que :

$$\chi_k(\vec{x}, t) = \begin{cases} 1 & \text{si } \vec{x} \in \Omega_k \text{ au temps } t, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (3.38)$$

Ses propriétés sont :

$$\sum_k \chi_k = 1 , \quad (3.39)$$

et

$$\frac{\partial \chi_k}{\partial x_i} = -n_i^k \delta_\Gamma , \quad (3.40)$$

avec n_i^k la composante dans la direction i de $\vec{n}^k$, la normale à l'interface orientée vers l'extérieur de la phase k et δ_Γ une fonction delta de Dirac centrée sur l'interface. On peut noter que la fonction χ_k telle qu'elle est définie par 3.38 est une fonction d'Heavyside. On peut en voir une illustration sur la figure 3.7 (b) sur laquelle est tracée χ_l en fonction de r le rayon. En outre pour le cas diphasique liquide/gaz de ce mémoire il vient :

$$\chi_l = 1 - \chi_g . \quad (3.41)$$

Les équations 3.40 et 3.41 permettent d'écrire :

$$n_i^l = -n_i^g . \quad (3.42)$$

Les normales à l'interface dans les différentes phases sont donc égales en normes mais opposées, comme illustré sur la figure 3.7. Drew [27] propose une équation de transport pour χ_k :

$$\frac{\partial \chi_k}{\partial t} + u_i^\Gamma \frac{\partial \chi_k}{\partial x_i} = 0 , \quad (3.43)$$

avec u_i^Γ la vitesse de l'interface. Delhayé [24] exprime les conditions de saut comme :

- Relation de saut pour la masse :

$$\sum_k \rho_k (u_i^k - u_i^\Gamma) n_i^k = 0 . \quad (3.44)$$

Cette relation rend compte de l'égalité des flux de masse à l'interface. En effet, on peut remarquer dans cette équation que $\rho_k (u_i^k - u_i^\Gamma) n_i^k$ exprime le flux de masse de la phase k à l'interface. Étant donné qu'il n'y a pas création de masse à l'interface la somme des flux doit être nulle.

- Relation de saut pour la quantité de mouvement :

$$\sum_k \left(u_i^k (u_j^k - u_j^\Gamma) n_j^k + P_k n_i^k - D_{ij}^k n_j^k \right) + \sigma \kappa n_i \delta_\Gamma = 0 . \quad (3.45)$$

Cette relation de saut, quant à elle, rend compte de l'équilibre des forces à l'interface (dynamique, de frottement, de pression et de tension de surface), avec $n_i = n_i^g$. Il est à remarquer que la relation 3.45 est cohérente avec le fait que l'interface n'a pas de masse, celle-ci étant une surface de discontinuités .

De fait, on se place dans un écoulement isotherme et sans changement de phase. Dans ce cas, la vitesse normale à l'interface est imposée par la vitesse des fluides environnants. En utilisant la notation $\llbracket A \rrbracket_\Gamma = A_g - A_l$ afin d'exprimer le saut d'une variable A quelconque à l'interface, on a alors le saut suivant pour $\vec{u}$:

$$\llbracket \vec{u} \cdot \vec{n} \rrbracket_\Gamma = 0 , \quad (3.46)$$

avec $\vec{n}$ le vecteur normal à l'interface. La condition de non glissement pour les fluides visqueux au niveau de l'interface donne une relation de saut pour la composante tangentielle :

$$\llbracket \vec{u} \cdot \vec{t} \rrbracket_\Gamma = 0 , \quad (3.47)$$

avec $\vec{t}$ le vecteur tangent à l'interface. La première conséquence des ces relations de saut est que la vitesse est continue à travers l'interface. En effet, l'association des équations 3.46 et 3.47 permet d'écrire :

$$\llbracket \vec{u} \rrbracket_\Gamma = \vec{0} . \quad (3.48)$$

En conséquence, il apparaît donc également que la vitesse de l'interface est strictement égale à celle des phases :

$$\vec{u}^\Gamma = \vec{u} . \quad (3.49)$$

On souhaite obtenir les équations de bilan globales pour toutes les phases et valables sur tout le domaine Ω . On somme alors sur toutes les phases les équations 3.36 et 3.35 que l'on a préalablement multipliées par χ_k , on obtient alors :

- Masse :

$$\sum_k \left(\frac{\partial \chi_k u_i^k}{\partial x_i} + u_i^k n_i^k \delta_\Gamma \right) = 0 . \quad (3.50)$$

- Quantité de mouvement :

$$\sum_k \left(\frac{\partial \chi_k \rho_k u_i^k}{\partial t} + \frac{\partial \chi_k \rho_k u_i^k u_j^k}{\partial x_j} \right) = \sum_k \left(-\frac{\partial \chi_k P_k}{\partial x_i} + \frac{\partial \chi_k D_{ij}^k}{\partial x_j} + (n_j^k \rho_k u_i^k (u_j^\Gamma - u_j^k) + n_j^k S_{ij}^k - n_i^k P_k) \delta_\Gamma \right) . \quad (3.51)$$

On peut alors substituer des termes avec les relations de saut 3.45 et 3.44 dans 3.51. En utilisant les variables monofluides telles que $u_i = \sum_k \chi_k u_i^k$ on obtient alors une forme plus condensée de l'équation de bilan de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \sum_k \frac{\partial \chi_k D_{ij}^k}{\partial x_j} - \sigma \kappa n_i \delta_\Gamma . \quad (3.52)$$

En choisissant, par convention, $n_i = n_i^g$ la normale orientée du gaz vers le liquide. Il convient ici de prendre des précautions avec le terme visqueux, en effet on ne peut

utiliser directement les grandeurs monophasiques. Ceci fait apparaître un produit de 2 distributions qui n'est pas clairement défini mathématiquement. Plus explicitement, il vient :

$$\sum_k \chi_k D_{ij}^k = \sum_k \chi_k \mu_k \left(\frac{\partial u_i^k}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j^k}{\partial x_i} \right) . \quad (3.53)$$

Les 2 termes en gradient de vitesse induisent alors l'apparition de $\chi_k \delta_\Gamma$. En effet :

$$\sum_k \chi_k \mu_k \frac{\partial u_i^k}{\partial x_j} = \sum_k \chi_k \mu_k \left(\frac{\partial \chi_k u_i^k}{\partial x_j} + u_i^k n_j^k \delta_\Gamma \right) . \quad (3.54)$$

Il en va de même pour le gradient transposé. Néanmoins, l'hypothèse d'interface inerte va permettre de simplifier quelque peu le problème. On peut écrire, en rappelant la relation 3.42, avec les hypothèses précédentes, $\forall i, j \in \{1, 2, 3\}$:

$$\begin{aligned} \sum_k u_i^k n_j^k \delta_\Gamma &= (u_i^g n_j^g + u_i^l n_j^l) \delta_\Gamma \\ &= \underbrace{(u_i^g - u_i^l)}_0 n_j^g \delta_\Gamma = 0 . \end{aligned} \quad (3.55)$$

Cette dernière relation permet, entre autre, de s'affranchir du produit $\chi_k \delta_\Gamma$ problématique dans le terme visqueux de l'équation de bilan de la quantité de mouvement 3.52.

Au final, il est possible d'exprimer le jeu d'équations monofluides régissant la dynamique de l'écoulement, sous les hypothèses précédemment énoncées. Par souci de clarté, ces équations sont résumées sur la planche 3.1 ainsi que les hypothèses permettant de les établir.

3.3.2.2 Filtrage des équations monofluides

A ce point, nous avons détaillé les équations locales instantanées permettant de décrire simultanément les 2 phases ainsi que les sauts présents au niveau de l'interface. Comme dans le paragraphe 3.3.1, l'opération de filtrage appliquée aux relations 3.56, 3.57 et 3.59 fait apparaître des termes non fermés. Non seulement on retrouve le terme de sous maille issu de la convection mais également de nouveaux termes dus aux considérations multi-phasiques.

On obtient le système suivant pour les grandeurs filtrées :

- Bilan de masse filtré :

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 . \quad (3.60)$$

- Bilan de quantité de mouvement filtré :

PLANCHE 3.1 – Equations monofluides et hypothèses utilisées dans le présent mémoire

- Masse

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 . \quad (3.56)$$

- Quantité de mouvement :

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial D_{ij}}{\partial x_j} - \sigma \kappa n_i \delta_\Gamma . \quad (3.57)$$

avec :

$$D_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.58)$$

- Evolution de l'interface

$$\frac{\partial \chi_k}{\partial t} + u_i \frac{\partial \chi_k}{\partial x_i} = 0 . \quad (3.59)$$

Sous les hypothèses de travail suivantes :

- Incompressible par phase
- Les grandeurs physiques ρ et μ sont constantes au sein de chaque phase
- Pas de changement de phase
- Isotherme

$$\frac{\partial \bar{\rho} \bar{u}_i + \tau_{\rho u_i}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j + \tau_{\rho u_i u_j}}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{D}_{ij} + \tau_{D_{ij}}}{\partial x_j} - \underbrace{\overline{\sigma \kappa n_i \delta_\Gamma}}_{\tau_{\sigma_i}} , \quad (3.61)$$

où $\bar{D}_{ij}$ est le tenseur des contrainte visqueuse résolu :

$$\bar{D}_{ij} = \bar{\mu} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) . \quad (3.62)$$

- Evolution de l'interface filtrée :

$$\frac{\partial \bar{\chi}_k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_i \bar{\chi}_k}{\partial x_i} + \tau_\chi = 0 . \quad (3.63)$$

Avec les termes de sous mailles suivants :

$$\tau_\chi = \overline{u_i \frac{\partial \chi}{\partial x_i}} - \bar{u}_i \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial x_i} , \quad (3.64)$$

$$\tau_{\rho u_i} = \overline{\rho u_i} - \bar{\rho} \bar{u}_i , \quad (3.65)$$

$$\tau_{\rho u_i u_j} = \overline{\rho u_i u_j} - \bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j , \quad (3.66)$$

$$\tau_{D_{ij}} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\mu} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right) , \quad (3.67)$$

$$\tau_{\sigma_i} = \overline{\sigma \kappa n_i \delta_\Gamma} . \quad (3.68)$$

Les inconnues que l'on cherchera à résoudre dans le système composé des équations 3.60, 3.61 et 3.63 sont les grandeurs filtrées $\bar{u}$, $\bar{P}$ et $\bar{\chi}$. Les termes de sous maille impliquant des corrélations entre les grandeurs non résolues, une modélisation sera nécessaire. Dans la suite on utilisera les dénominations suivantes pour les termes de sous maille :

τ_χ	: « terme interfacial »
$\tau_{\rho u_i}$	: « terme temporel »
$\tau_{\rho u_i u_j}$	: « terme convectif »
$\tau_{D_{ij}}$	: « terme diffusif »
τ_{σ_i}	: « terme de tension de surface »

Ceux-ci réclament quelques explications afin de mieux comprendre leurs origines.

La discontinuité des grandeurs physiques ρ et μ au niveau de l'interface est responsable de l'apparition des termes $\tau_{\rho u_i}$ et $\tau_{D_{ij}}$ respectivement. Plus spécifiquement, $\tau_{\rho u_i}$, présent dans la dérivée temporelle du bilan de quantité de mouvement, rend compte des corrélations entre le champ de vitesse et la masse volumique. Et $\tau_{D_{ij}}$ rend compte, quant à lui, des corrélations entre le champ de vitesse et la viscosité.

Issu de la partie convective, $\tau_{\rho u_i u_j}$ est le seul terme qui est également présent dans le cas monophasique (c.f. § 3.3.1) à ceci près que la masse volumique n'intervenait pas

dans ce cas, car celle-ci était alors constante. Il est composé d'une corrélation triple due à la discontinuité de la masse volumique d'une part et aux fluctuations de vitesse de sous maille (u') d'autre part.

τ_χ et τ_{σ_i} sont issus des déformations interfaciales non résolues. En effet, à l'échelle du filtre toutes les déformations peuvent ne pas être décrites, ceci implique $\bar{n}_i \neq n_i$ et $n'_i \neq 0$. τ_χ rend alors compte des corrélations entre le champ de vitesse et la normale à l'interface (rappelons que l'on a $\frac{\partial \chi_k}{\partial x_i} = -n_i^k \delta_\Gamma$, c.f. 3.40), et τ_{σ_i} des corrélations entre la courbure moyenne de l'interface et la normale.

On peut noter ici que loin de l'interface et sous nos hypothèses de travail (ρ et μ constantes par phase) tous les termes de sous maille sont nuls, à l'exception du terme convectif $\tau_{\rho u_i u_j}$. Les termes de sous mailles supplémentaires sont donc inhérents au diphasique, c'est-à-dire au saut des grandeurs physiques et à la fonction indicatrice de phase. Plus précisément lorsque l'interface n'est plus comprise dans le volume du noyau de convolution du filtre LES, on revient alors à une formulation monophasique.

3.3.2.3 Filtrage de Favre

De façon classique lorsque qu'une variation de masse volumique est impliquée, on peut définir le filtrage de Favre pour une variable f comme :

$$\tilde{f} = \frac{\overline{\rho f}}{\bar{\rho}} . \quad (3.69)$$

De cette manière, même si la masse volumique est constante au sein de chaque phase, la variation de celle-ci au niveau de l'interface est prise en compte. Ce filtrage semble intéressant dans la mesure où il permet de s'affranchir du terme de sous maille temporel, en effet :

$$\frac{\partial \overline{\rho u_i}}{\partial t} = \frac{\partial \bar{\rho} \bar{u}_i}{\partial t} - \frac{\partial \overline{\rho u_i} - \bar{\rho} \bar{u}_i}{\partial t} , \quad (3.70)$$

$$= \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} . \quad (3.71)$$

Cependant, comme cela à été mentionné par Toutant *et al* [127] et Labourasse *et al* [59], lorsque les 2 phases sont incompressibles, le champ de vitesse au sens de Favre n'est pas à divergence nulle, il y a apparition d'un nouveau terme de sous maille pour l'équation bilan de masse filtrée et l'incompressibilité devient difficile à traiter. En outre on a :

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} = \frac{\llbracket \rho \rrbracket_\Gamma}{\bar{\rho}} (\delta_\Gamma n_i u_i - \delta_\Gamma n_i \tilde{u}_i) . \quad (3.72)$$

Ce terme est difficile à fermer et peut avoir un impact très fort sur la stabilité des simulations, comme le notent Toutant *et al* [127, 126] sur des tests *a posteriori*. En effet, autant les termes de sous mailles présents dans l'équation de transport de la quantité de mouvement 3.61 peuvent se compenser, autant le terme de sous maille supplémentaire

dans l'équation 3.72 ne peut être négligé car il est seul et doit être comparé à 0. On s'attend alors à ce que sa modélisation soit très précise car une petite variation de ce terme influera significativement l'équation 3.72. Il est possible de trouver dans la littérature des cas où ce terme est négligé, par exemple Liovic *et al* [77] utilisent $\partial \tilde{u}_i / \partial x_i = 0$ dans le cas d'un écoulement avec bulles, considérant que le maillage LES est suffisamment raffiné pour faire cette hypothèse. Les auteurs mentionnent toutefois que cette solution est clairement dépendante du maillage utilisé et requiert une attention particulière vis-à-vis des schémas numériques utilisés.

Dans la mesure où l'écoulement que nous cherchons à modéliser est incompressible par phase et sans évaporation, à l'instar de Toutant *et al* [127, 126] et Labourasse *et al* [59], nous n'avons pas de raison de penser que nos conclusions seront différentes de ces auteurs. On choisit donc de rester avec le filtrage au sens de Reynolds. Néanmoins, notons tout de même qu'un réexamen de ce choix pourrait être envisagé dans le cas d'un écoulement avec évaporation car alors le champ de vitesse monofluide n'est plus à divergence nulle.

3.4 Modélisation de sous maille

Comme nous l'avons vu, l'opération de filtrage appliquée aux équations de transports de l'écoulement induit l'apparition de termes de sous maille. Et ce, aussi bien dans le cas monophasique (équation 3.34), que dans le cas liquide/gaz (équation 3.61). Ces termes vont nécessiter une fermeture, dans la mesure où ils font intervenir des corrélations de sous maille. A l'instar de τ_{ij} , dans l'équation 3.34, qui fait intervenir une corrélation entre les composantes du vecteur vitesse non résolue dans les directions i et j , tel que $\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j$.

La modélisation de sous maille consiste alors à fermer les termes de sous maille, en utilisant des considérations physiques et en s'appuyant sur les variables hydrodynamiques effectivement résolues en LES, celles-ci étant les seules dont on dispose théoriquement dans une simulation réelle. Par exemple, on peut chercher à fermer le tenseur τ_{ij} , grâce au champ de vitesse résolu, tel que :

$$\tau_{ij} = f(\bar{u}_i, \bar{u}_j, \bar{\Delta}) , \quad (3.73)$$

toute la difficulté de l'exercice consiste alors à trouver la forme de la fonction f rendant compte de la contribution de sous maille pour une échelle de coupure, $\bar{\Delta}$, donnée.

La modélisation de sous maille a fait l'objet de nombreuses études et de nombreux développements, et encore aujourd'hui ce domaine est très actif. Si bien, que le panorama des modèles de sous maille est très étendu et de nombreuses fermetures coexistent. Le lecteur intéressé pourra trouver une liste relativement exhaustive des modèles de sous maille dans le livre de Sagaut [109] ou encore celui de Geurts [37].

Dans ce contexte, on ne détaillera alors, dans la suite, que les modèles que nous avons étudiés et utilisés dans le cadre de ce mémoire. Dans un formalisme monophasique dans un premier temps, pour une question de simplicité.

3.4.1 Modèles monophasiques classiques

Il convient de rappeler qu'initialement le concept de simulation aux grandes échelles a été développé pour la prédiction météorologique avec les travaux fondateurs de Smagorinsky [120] en 1963. Il s'ensuit logiquement que les premiers modèles ont été proposés pour des écoulements gazeux et non réactifs.

Dans ce cadre, les équations de transport sont constituées du bilan de masse 3.31 et de quantité de mouvement 3.34. Celle-ci s'exprime sous la forme :

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right) - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} , \quad (3.74)$$

où ν est la viscosité cinématique, telle que $\nu = \mu/\rho$.

Ainsi, seul le terme τ_{ij} requiert une modélisation. On rappelle son expression :

$$\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j . \quad (3.75)$$

3.4.1.1 Décompositions de Léonard/Germano

Si on décompose la vitesse en considérant l'équation 3.3, il vient pour la vitesse dans la direction i :

$$u_i = \bar{u} + u' . \quad (3.76)$$

τ_{ij} peut alors être réécrit comme :

$$\tau_{ij} = L_{ij} + C_{ij} + R_{ij} , \quad (3.77)$$

avec :

$$L_{ij} = \overline{\bar{u}_i \bar{u}_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j , \quad (3.78)$$

$$C_{ij} = \overline{u'_i \bar{u}_j} + \overline{\bar{u}_i u'_j} , \quad (3.79)$$

$$R_{ij} = \overline{u'_i u'_j} . \quad (3.80)$$

Cette décomposition est appelée décomposition de Léonard [71]. L_{ij} est le tenseur de Léonard, C_{ij} le terme croisé et R_{ij} le tenseur de Reynolds de sous maille. Tout modèle devra donc être à même de reproduire la contribution du tenseur croisé, C_{ij} , et du tenseur de Reynolds, R_{ij} . En effet, on voit ici que le tenseur de Léonard L_{ij} est entièrement résolu. Germano [35] remarque, dans cette décomposition, que même si τ_{ij} est un invariant galiléen, les termes qui le compose ne le sont pas d'une manière générale. Ce dernier propose alors une décomposition qui n'utilise que des invariants galiléens, telle que :

$$\tau_{ij} = \mathcal{L}_{ij} + C_{ij} + \mathcal{R}_{ij} , \quad (3.81)$$

avec

$$\mathcal{L}_{ij} = \overline{\bar{u}_i \bar{u}_j} - \bar{\bar{u}_i} \bar{\bar{u}_j} , \quad (3.82)$$

$$C_{ij} = \overline{u'_i \bar{u}_j} - \bar{u'_i} \bar{\bar{u}_j} + \overline{\bar{u}_i u'_j} - \bar{\bar{u}_i} \bar{u'_j} , \quad (3.83)$$

$$\mathcal{R}_{ij} = \overline{u'_i u'_j} - \bar{u'_i} \bar{u'_j} . \quad (3.84)$$

Cette décomposition est locale en espace et en temps quel que soit le filtre utilisé. Celle-ci va être utilisée pour les 2 modèles présentés.

3.4.1.2 Modèle visqueux

Concept de base : Originellement, la première méthode ayant permis de fermer τ_{ij} est celle du modèle de Smagorinsky [120]. Ce modèle tente de reproduire l'effet de la dissipation des plus grands tourbillons de la même manière que la diffusion moléculaire dissipe l'énergie de l'écoulement. C'est-à-dire grâce à une viscosité, ν_t , qui sera appelée viscosité turbulente de sous maille. On reproduit alors la structure mathématique du processus de diffusion moléculaire en reprenant l'hypothèse de Boussinesq. On écrit alors :

$$-\frac{\partial \tau_{ij}^a}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right) . \quad (3.85)$$

Dans la mesure où ce modèle considère un tenseur de trace nulle, τ_{ij}^a est définie comme la partie anisotrope de τ_{ij} :

$$\tau_{ij}^a = \tau_{ij} - \frac{1}{3} \tau_{kk} \delta_{ij} . \quad (3.86)$$

Beaucoup d'auteurs considèrent que la partie isotrope, $1/3 \tau_{kk} \delta_{ij}$ ne nécessite pas de modélisation². Elle est alors intégrée à la pression filtrée, $\bar{P}$, pour la résolution. L'équation de transport de la quantité de mouvement, 3.74, peut alors s'exprimer :

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left((\nu + \nu_t) \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right) . \quad (3.87)$$

Reste alors à exprimer la viscosité de sous maille, ν_t , qui peut rendre compte de la dissipation de l'énergie par les plus petites échelles. Une analyse dimensionnelle de ν_t montre que cette viscosité doit s'exprimer comme un produit entre une vitesse caractéristique u_c et une longueur caractéristique l_c , soit $\nu_t = l_c u_c$. A ce point, de nombreuses modélisations ont été proposées.

Approche de Smagorinsky [120] : Dans sa version initiale, le modèle de Smagorinsky [120] est l'équivalent direct du modèle de longueur de mélange de Prandtl. Le choix le plus naturel, en LES, pour la longueur l_c est la taille du filtre $\bar{\Delta}$ et la vitesse u_c est choisie comme $u_c = \bar{\Delta} |\bar{S}|$. Où $|\bar{S}|$ est une mesure de l'intensité du gradient de vitesse résolu,

2. Néanmoins des modélisations existent, on pense notamment au modèle de Yoshizawa [143].

$|\bar{S}| = \sqrt{2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij}}$. On rappelle que le tenseur des efforts résolus s'exprime quant à lui $\bar{S}_{ij} = 1/2(\partial\bar{u}_i/\partial x_j + \partial\bar{u}_j/\partial x_i)$. En résumant, la viscosité de sous maille ν_t peut s'exprimer :

$$\nu_t = 2C_s\bar{\Delta}^2|\bar{S}|, \quad (3.88)$$

avec C_s une constante du modèle, appelée constante de Smagorinsky. Une analyse dimensionnelle montre que cette constante est de l'ordre de $C_s \approx 0.01$ dans le cas d'une turbulence homogène et isotrope.

En pratique, la valeur de cette constante oscille entre 0.01 et 0.03 selon les écoulements que l'on cherche à simuler. En effet, il se trouve que la valeur de C_s doit être ajustée en fonction de la géométrie ou des conditions initiales. Ce point précis a amené certains auteurs à se demander si C_s ne pouvait pas s'« autodéterminer » en fonction des échelles résolues. C'est la base des modèles dynamiques de sous maille. Dans ce cas, C_s n'est plus vue comme une constante mais comme un coefficient, qui varie en fonction de l'écoulement local.

Procédures dynamiques : La description de l'approche dynamique de la LES va nous permettre d'introduire le concept de filtre « test ». En effet, Germano *et al* [35, 36] proposent d'utiliser une deuxième coupure à un niveau dit « test » dans la zone inertielle du spectre. Cette coupure est effectuée plus bas dans les nombres d'ondes, de telle sorte que $k_{test} < k_c$. Ce qui revient à écrire pour $\hat{\Delta}$, la taille du filtre test : $\hat{\Delta} > \bar{\Delta}$. Il est alors possible de calculer le flux énergétique au niveau du filtre test, ce qui va permettre d'estimer le flux de sous maille. Cette situation est résumée sur la figure 3.8.

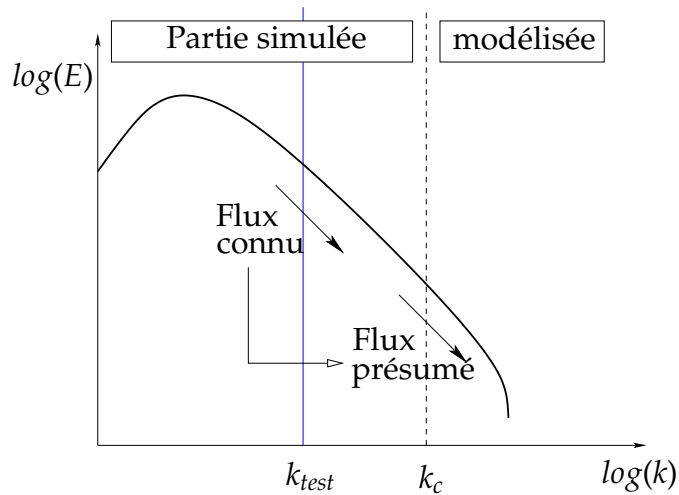


FIGURE 3.8 – Coupure du spectre au niveau « test », l'estimation du flux d'énergie au niveau du filtre test permet d'estimer le flux vers les échelles de sous maille.

On détaille quelque peu la procédure initiale de Germano *et al* [35, 36] dans la suite. Le filtre au niveau test est donc appliqué à l'équation de transport filtrée, 3.74. On obtient alors :

$$\frac{\partial \widehat{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \widehat{u}_i \widehat{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \widehat{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu \left(\frac{\partial \widehat{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \widehat{u}_j}{\partial x_i} \right) \right) - \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} , \quad (3.89)$$

avec $T_{ij} = \widehat{u_i u_j} - \widehat{u_i} \widehat{u_j}$, un nouveau terme de sous maille mais cette fois au niveau $\widehat{\Delta}$. Le terme de Léonard $\mathcal{L}_{ij}$ au niveau test peut être directement calculé à partir du champ de vitesse résolu. D'autre part, il vient :

$$T_{ij} - \widehat{\tau_{ij}} = \widehat{u_i u_j} - \widehat{u_i} \widehat{u_j} = \mathcal{L}_{ij} . \quad (3.90)$$

En appliquant le modèle de Smagorinsky à T_{ij} et τ_{ij} :

$$\tau_{ij}^a = -2C_s \overline{\Delta}^2 |\overline{S}| \overline{S}_{ij} \text{ et } , \quad (3.91)$$

$$T_{ij}^a = -2C_s \widehat{\Delta}^2 |\widehat{S}| \widehat{S}_{ij} , \quad (3.92)$$

la relation 3.90 s'exprime alors :

$$\mathcal{L}_{ij}^a = 2C_s M_{ij} , \quad (3.93)$$

avec :

$$M_{ij} = \overline{\Delta}^2 |\overline{S}| \overline{S}_{ij} - \widehat{\Delta}^2 |\widehat{S}| \widehat{S}_{ij} . \quad (3.94)$$

Il est alors possible d'estimer la valeur de C_s qui satisfait au mieux l'équation 3.93, dans la mesure où toutes les autres grandeurs sont calculables à partir du champ résolu. Cependant, on peut remarquer ici que l'équation 3.93 équivaut à 5 relations indépendantes. Ainsi, C_s est alors local, non seulement spatialement et temporellement mais dépend également des indices i et j . Afin d'obtenir une valeur locale et isotrope du coefficient C_s , Germano *et al* [35, 36] proposent de réduire l'équation 3.93 par $\overline{S}_{ij}$ afin d'obtenir :

$$C_s = \frac{1}{2} \left(\frac{\mathcal{L}_{ij}^a \overline{S}_{ij}}{M_{ij} \overline{S}_{ij}} \right) \quad (3.95)$$

Les auteurs remarquent tout de même que le dénominateur de cette dernière relation peut parfois devenir suffisamment petit pour mener à des valeurs de C_s locales qui rendent le calcul instable d'un point de vue numérique. Pour contourner ce problème Lilly [75] propose une modification qui consiste à minimiser l'erreur sur l'estimation de C_s . En définissant Q comme le carré de l'erreur dans la relation 3.93 :

$$Q = (\mathcal{L}_{ij}^a - 2C_s M_{ij})^2 , \quad (3.96)$$

et en cherchant $\partial Q / \partial C_s = 0$, C_s est alors évalué par :

$$C_s = \frac{1}{2} \left(\frac{\mathcal{L}_{ij}^a M_{ij}}{M_{ij} M_{ij}} \right) . \quad (3.97)$$

Dans cette dernière relation, pour que le dénominateur tende vers 0 il faut que les 5 composantes indépendantes de M_{ij} tendent vers 0. Auquel cas le numérateur serait également nul. De plus, dans la mesure où le numérateur de l'équation 3.97 peut prendre des valeurs négatives, cela peut permettre de rendre compte du phénomène de « backscatter », lorsqu'un transfert d'énergie se fait des plus petites échelles vers les grandes.

Un dernier point dans cette procédure dynamique concerne la localisation de la deuxième coupure dans le spectre d'énergie cinétique. Germano *et al* [36] trouvent que le ratio optimum entre la taille du filtre test et le filtre de sous maille doit être tel que :

$$\widehat{\Delta}/\overline{\Delta} = 2 . \quad (3.98)$$

En pratique, le modèle de Smagorinsky a permis d'obtenir de nombreux résultats satisfaisants dans le cadre monophasique, avec la méthode dynamique, mais également avec un coefficient C_s constant .

Dans la suite nous chercherons donc à tester ce modèle. Dans un premier temps avec C_s constant, puis ensuite avec la procédure dynamique de Germano *et al* [35, 36] modifiée par Lilly [75].

3.4.1.3 Modèle de similarité d'échelles

Dans la modélisation précédente, le but est de reproduire l'effet dissipatif ou dispersif de τ_{ij} avec des considérations physiques sans nécessairement avoir la même structure mathématique de τ_{ij} modélisé, Sagaut [109] parle alors de modélisations *fonctionnelles*. Un deuxième type de modélisation possible consiste à tenter de reproduire la forme statistique du tenseur τ_{ij} à partir des échelles résolues. Il s'agit alors de modélisations *structurelles* [109].

Le modèle le plus simple est celui de similarité d'échelles, proposé initialement par Bardina *et al* [3]. Il consiste à fermer τ_{ij} en utilisant le terme de Léonard, $\mathcal{L}_{ij}$ de la décomposition de Germano 3.81, il vient alors :

$$\tau_{ij} \sim \overline{\overline{u_i u_j}} - \overline{\overline{u_i}} \overline{\overline{u_j}} . \quad (3.99)$$

En pratique, on utilise une nouvelle fois la coupure au niveau test afin d'estimer τ_{ij} :

$$\tau_{ij} \simeq C_\tau (\widehat{\overline{u_i u_j}} - \widehat{\overline{u_i}} \widehat{\overline{u_j}}) , \quad (3.100)$$

où C_τ est une constante. On considère alors que la structure statistique du tenseur évalué au niveau des grandes échelles (au niveau test) est identique celle du tenseur de sous maille. Physiquement, ceci revient à considérer qu'il y a une certaine similarité de comportement du tenseur entre les échelles au sein de la zone inertielle du spectre. Ce qui rejoint quelque peu l'idée de Germano *et al* [35, 36] schématisée sur la figure 3.8. Dans son formalisme, ce modèle permet également de prendre en compte le phénomène de cascade inverse ou « backscatter ».

Cette modélisation arrive à bien reproduire la structure du tenseur de sous maille, entre autre sa partie isotrope. Cependant, il semblerait que son application dans des cas pratiques mène à des instabilités numériques. C'est ce que relève, par exemple, Vreman

et al [136, 137]. Il semble que ce modèle n'arrive pas toujours à dissiper le bon niveau d'énergie.

Néanmoins, de nombreux tests réalisés à partir de DNS montrent un bon comportement *a priori* de ce modèle. En outre, dans le cas liquide/gaz, Toutant [126], dans ses travaux de thèse, a réussi à l'adapter pour le développement du concept *ISS* (*Interfaces and Subgrid Scales*)

3.4.1.4 Modèle mixte

On peut souligner qu'il existe des modélisations mixtes qui cherchent à tirer parti des avantages et des inconvénients de chaque modélisation. Par exemple, partant du constat suivant :

- Le modèle de Smagorinsky semble être à même de bien estimer le flux énergétique dissipé en sous maille, mais ne reproduit pas bien la partie isotrope du tenseur de sous maille,
- alors que le modèle de similarité d'échelles rend bien compte de la structure mathématique de τ_{ij} mais est trop peu dissipatif,

Bardina *et al* [3] proposent un modèle dit mixte qui permet de combiner les avantages des 2 modélisations *fonctionnelle* et *structurelle*. Ils écrivent alors :

$$\tau_{ij} = C_\tau (\widehat{\bar{u}_i \bar{u}_j} - \widehat{\bar{u}_i} \widehat{\bar{u}_j}) - 2C_s \bar{\Delta}^2 |\bar{S}| \bar{S}_{ij} . \quad (3.101)$$

Néanmoins ce modèle ne sera pas étudié ici.

3.5 Analyses *a priori*

Dans cette section nous allons conduire des tests dits *a priori*. Le but est donc d'estimer, à partir de données DNS disponibles, quelles sont les modélisations à même de rendre compte des contributions de sous maille exactes dans le cadre de l'atomisation liquide/gaz.

Dans un premier temps on va donc rappeler le principe des tests *a priori*. Ensuite, on appliquera cette procédure afin d'estimer la perspicacité des modèles de sous maille présentés section 3.4.1. À savoir, le modèle de Smagorinsky [120] et celui de similarité d'échelles [3].

3.5.1 Principe des tests *a priori*

Il nous paraît important avant toute chose de rappeler le principe des tests *a priori*. La LES peut être considérée comme la réponse d'un champ totalement résolu à une opération de filtrage spatial, c'est d'ailleurs de cette manière que nous avons établi les équations filtrées. Donc, de façon pratique, pour peu que l'on dispose de données issues d'une DNS dans laquelle suffisamment d'échelles ont été résolues, alors il est possible d'obtenir la contribution des termes de sous maille, et ce par une simple opération de filtrage. Des informations intéressantes sur les mécanismes de transfert énergétique

ayant lieu entre les grandes et les plus petites échelles de l'écoulement peuvent alors être obtenues. En outre, les ordres de grandeur des termes de sous maille peuvent être comparés, non seulement entre eux, mais aussi par rapport à la contribution totale des flux convectifs et visqueux. Les tests *a priori* vont même un peu plus loin, en considérant que si l'on peut extraire les termes de sous maille exacts à partir de la DNS, alors il est également possible d'extraire leur modélisation, dans la mesure où l'on dispose de toutes les informations nécessaires, tant d'un point de vue de la turbulence que du point de vue de la résolution de l'interface.

La figure 3.9 présente un diagramme qui illustre cette technique. Partant de champs hydrodynamiques issus d'une DNS, il est possible d'extraire, d'une part, les contributions de sous mailles exactes. En effet, en considérant un terme, tel τ_{ij} défini comme $\tau_{ij} = \overline{u_i u_j}$, la corrélation entre u_i et u_j étant accessible en DNS, une simple opération de filtrage donne $\tau_{ij} = G \star (u_i u_j)$, la corrélation de sous maille exacte. D'autre part, il est évidemment possible d'obtenir les champs hydrodynamiques filtrés, ceux là même qui sont hypothétiquement résolus par la LES. Par exemple, $\overline{u_i} = G \star u_i$ et $\overline{u_j} = G \star u_j$. On peut alors chercher à savoir si une modélisation à partir des champs résolus, par exemple $m_{ij} = f(\overline{u_i}, \overline{u_j})$, permet de rendre compte du terme de sous maille exact τ_{ij} .

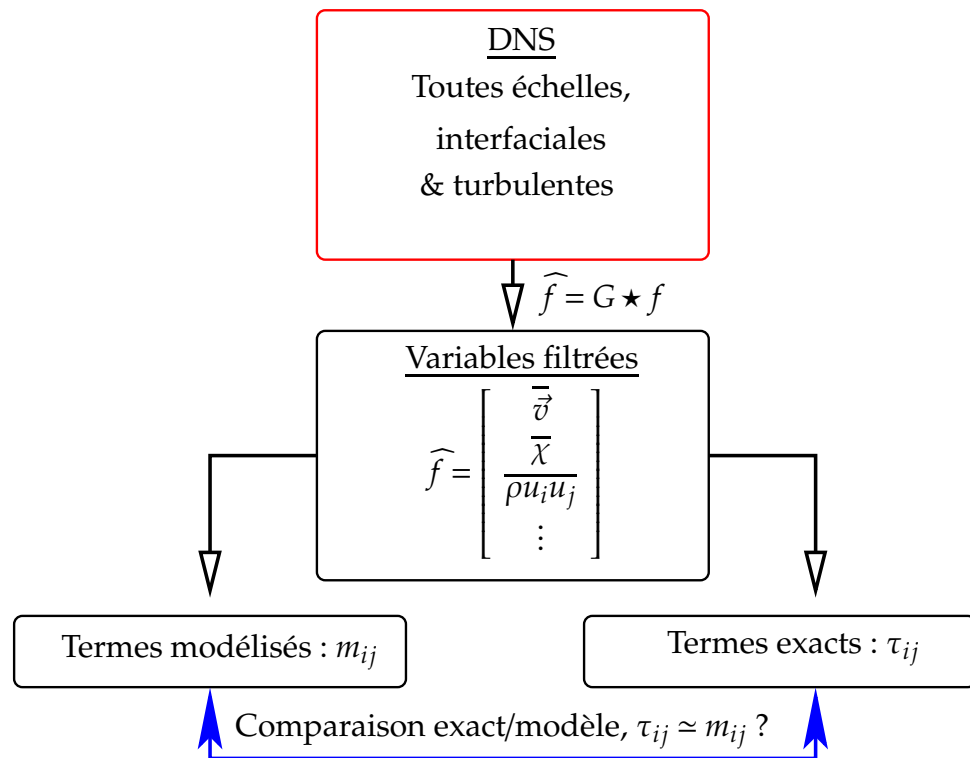


FIGURE 3.9 – Schéma de principe des tests *a priori*.

Il nous paraît important de conduire ces analyses *a priori* car ce genre d'étude n'a, à notre connaissance, jamais été conduite sur un cas d'atomisation d'un jet liquide/gaz, pour la simple raison que les DNS d'atomisation telles que celles obtenues par Ménard [90] sont issues de calculs précurseurs. On va alors vouloir savoir quels sont les termes de sous maille prépondérants dans l'équation de transport de la quantité de mouvement 3.61, ainsi que la contribution des flux de sous maille face au flux résolu dans l'équation

de transport de la fonction de phase 3.61. Cette « hiérarchisation » des termes de sous maille va permettre de savoir s'il est possible de négliger des termes par rapport à la contribution totale des termes de sous maille dans le cas d'un jet d'atomisation. Cette étude est présentée dans la section 3.5.3. Ensuite, le comportement des modèles de sous maille va être testé, dans le cadre *a priori*. On verra que cette étude va, en outre, permettre d'estimer l'ordre de grandeur des constantes du modèle de similarité d'échelles. Ceci est l'objet de la section 3.5.4.

Cependant, nous verrons les tests de sous maille ne présentent pas que des avantages, notamment considérant le fait que les tests sont réalisés sur un cas DNS où le nombre de Reynolds turbulent est relativement bas et donc où les échelles de la turbulence ne sont pas pleinement développées. Ce qui peut amener à un manque d'informations comparé à un cas à très fort nombre de Reynolds. On discutera des limitations de ces tests *a priori* en section 3.5.4.7.

3.5.2 Présentation du cas DNS de référence

Afin de conduire les tests *a priori*, une simulation d'un jet liquide d'atomisation a été conduite avec un solveur DNS. Ce solveur, nommé ARCHER, est issu des travaux de Ménard *et al* [91, 90]. Ces auteurs ont développé au fils des ans un outil numérique capable de résoudre les équations de Navier-Stokes tout en prenant en compte la présence d'une interface liquide/gaz au sein du domaine de calcul, grâce à un couplage des méthodes de suivi d'interface level-set/VOF. Un bref historique va permettre de revenir sur les motivations et les méthodes utilisées.

Précisons que les calculs nécessaires ont été conduits spécialement lors de des présents travaux de thèse afin de disposer des variables voulues pour ces analyses de sous maille.

3.5.2.1 Généralités sur le code ARCHER

Initialement mû par la volonté de décrire les écoulements liquide/gaz, Tanguy [125] a développé, au cours de ses travaux de thèse, une technique numérique de suivi d'interface couplée à un solveur Navier-Stokes. Cette méthode de suivi d'interface liquide/gaz est basée sur la méthode level-set dont le formalisme initial a été proposé par Osher *et al* [96]. L'idée est de décrire la propagation d'une interface par le transport d'une fonction mathématique $\varphi(\vec{x}, t)$ représentant la distance algébrique à l'interface pour une position donnée par le vecteur $\vec{x}$ à l'instant t . Le niveau 0 de cette fonction représente alors l'interface, Γ , qui est donc définie telle que :

$$\Gamma = \{\vec{x} | \varphi(\vec{x}, t) = 0\} . \quad (3.102)$$

Il est possible de dériver une équation de transport pour cette fonction level-set, concernant toutes les lignes de niveaux, il vient :

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + u_i \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} = 0 . \quad (3.103)$$

Outre le fait que la fonction level-set possède de meilleures propriétés algébriques que les méthodes du type Volume Of Fluid (VOF), elle est également fort appropriée afin de prendre en compte les discontinuités à l'interface grâce à la *Ghost Fluid Method* (GFM). Cette dernière, proposée et développée par Fedkiw *et al* [33, 80, 53] permet une extension continue, de chaque côté de l'interface, des grandeurs discontinues. La GFM a alors été également intégrée dans le solveur Navier-Stokes développé par Tanguy [125]. Ce dernier a alors testé la validité des méthodes sur des impacts binaires de gouttes (c.f. Berlemont *et al* [9]) dont les résultats sont en bon accord avec les expériences de Ashgriz *et al* [1]. Il propose également une étude préliminaire sur la simulation de la rupture d'un jet liquide en utilisant les méthodes level-set et GFM. Cette étude de faisabilité met en lumière des pertes de masse importantes, un défaut récurrent et connu de la méthode level-set. En effet, autant la perte de masse reste faible dans le cas des collisions de gouttes, autant il n'est plus possible de la négliger dans le cas de la rupture d'un jet liquide.

C'est dans ce contexte que les travaux de thèse de Ménard [90] ont mené au développement d'une méthode de suivi d'interface conservative en masse afin de l'appliquer à la rupture de jets liquides. Pour ce faire, un couplage entre les 2 grandes méthodes de suivi d'interface Eulériennes a été utilisé. À savoir, la méthode level-set, qui permet une reconstruction précise de l'interface, et la méthode VOF, qui conserve mieux la masse. Schématiquement, après avoir transporté ces 2 grandeurs, la reconstruction de l'interface au sein des mailles à partir de la fonction level-set permet d'estimer la fraction de volume, l'orientation de l'interface et sa position. Une fraction de liquide peut être estimée à partir de ce plan, et si elle diffère de la valeur donnée par le VOF, sa position est modifiée jusqu'à concordance. Après avoir montré que le couplage VOF/level-set est bien conservatif en masse, l'auteur applique cette méthode à des cas de rupture de jets liquides. Notamment, et ce résultat nous intéresse, à une injection primaire monotrou avec des dimensions et des paramètres physiques proches d'une injection du type de celles rencontrées dans les moteurs diesel.

Il est possible de voir une image instantanée de l'interface/liquide gaz dans ce cas d'injection sur la figure 3.10. Ce cas correspond à un domaine de calcul de $0.3mm \times 0.3mm \times 2.4mm$ avec une vitesse d'injection de $100ms^{-1}$ et un diamètre d'injection $D_0 = 0.1mm$. Il est visible sur cette figure qu'une grande variété d'échelles et de topologies de structures liquides sont décrites. Proche injecteur (à gauche de l'image) les déformations initiales de la colonne liquide sont visibles avec peu de gouttes formées à cet endroit. Plus loin dans l'injection il y a formation de structures liquides plus complexe (e.g. filaments) et de gouttes de différents diamètres.



FIGURE 3.10 – Visualisation instantanée de l'interface liquide/gaz dans le cas DNS.

Une évolution temporelle de l'écoulement est présentée sur la figure 3.11, où l'interface liquide/gaz est tracée à différents temps de calcul. Au début de l'injection, Il y a apparition d'un champignon liquide en tête de la colonne liquide. Les instabilités de l'interface liquide/gaz sont clairement visibles, elles mènent alors à la formation de gouttes et ligaments. Il est également à noter que des gouttes de petite taille sont déjà présentes, autour de cette colonne en début d'injection. Pour le dernier pas de temps t présenté sur cette figure, il est visible que le cœur liquide a quasiment disparu, partiellement remplacé par un spray dense de gouttelettes et de structures liquides détachées qui quittent le domaine de calcul.

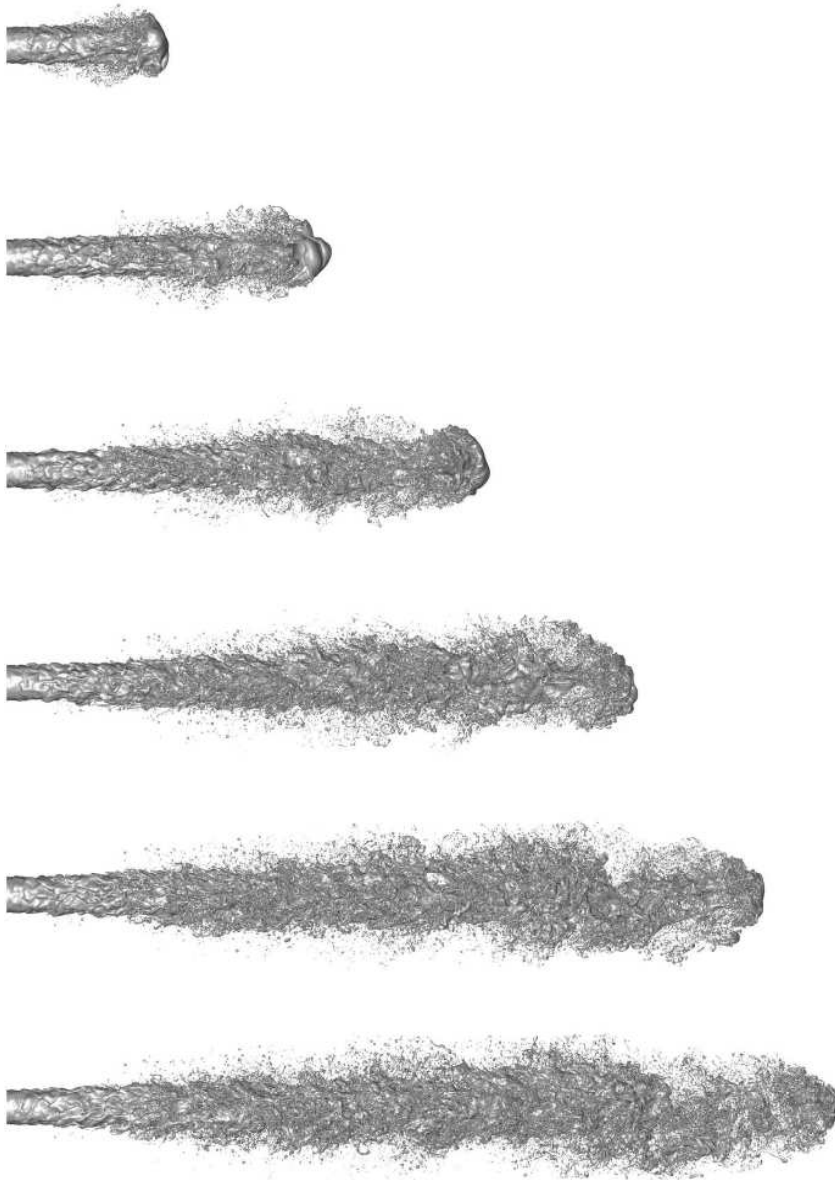


FIGURE 3.11 – Images instantanées du jet DNS d'atomisation, à plusieurs instants t (de haut en bas).

Le choix de la configuration à étudier dans le cadre des tests de sous maille s'est donc arrêté sur ce cas. Pour plusieurs raisons :

1. Cas de calcul proche, en terme de paramètres physique, d'une injection type Diesel. En effet si l'on tient à prendre en compte la zone d'injection primaire en LES dans les moteurs ce cas se place comme un point de comparaison particulièrement indiqué.
2. La géométrie du cas de calcul est relativement simple. L'injection est circulaire monotrou, et le calcul utilise un maillage cartésien. Ce qui simplifie grandement la discrétisation des opérateurs de dérivation et de filtrage nécessaires pour conduire les tests de sous maille.
3. Enfin, une grande variété d'échelles temporelles et spatiales est présente. Ce qui va permettre d'estimer dans quelle mesure le formalisme LES est à même de rendre compte de ces échelles.

3.5.2.2 Cas physique étudié

Configuration géométrique La configuration géométrique du cas DNS est précisée sur la figure 3.12. Il s'agit donc d'une injection monotrou de diamètre $D_0 = 0.1mm$, le domaine de calcul est parallélépipédique, de dimension $L_1 = L_2 = 0.3mm$ et $L_3 = 2.4mm$. On définit également un système de coordonnées cartésiennes $(x_1, x_2, x_3)'$, où les directions x_1 et x_2 correspondent aux directions transverses de l'écoulement et x_3 à la direction axiale.

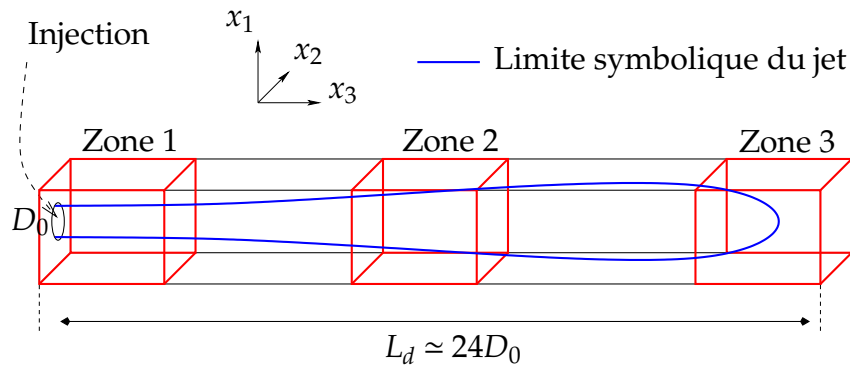


FIGURE 3.12 – Définition des zones d'études pour les tests de sous maille.

Le domaine est discrétisé avec un maillage cartésien $256 \times 256 \times 2048$ dont les mailles sont également réparties dans l'espace, ce qui conduit aux longueurs de discrétisation suivantes³ : $\Delta_{x_1} = \Delta_{x_2} = \Delta_{x_3} = 1.17\mu m$.

Paramètres physiques Le tableau 3.1 présente les caractéristiques physiques utilisées pour cette injection. C'est une injection proche d'une injection de type Diesel, néanmoins quelques différences apparaissent :

- La vitesse débitante, $U_d = 79m.s^{-1}$ est faible comparée à un cas d'injection Diesel. En effet, celle-ci est plutôt de l'ordre de $400m.s^{-1}$ à $500m.s^{-1}$.

3. Vu cette égalité, on utilisera Δ_x lorsque l'on mentionnera la taille de la maille de calcul.

- La valeur du coefficient de tension de surface, $\sigma = 0.06 \text{ N.m}$, est relativement élevée comparé par exemple au couple n-heptane/air que l'on utilise souvent comme référence dans ce type d'injection. Les données expérimentales font plutôt mention d'une valeur de $\sigma = 0.02 \text{ N.m}$.

Ces différences sont issues d'un choix afin de pouvoir augmenter la taille de la maille de calcul DNS, ce qui permet de diminuer le temps de calcul. Ménard *et al* [90, 91] définissent, en effet, un weber critique gazeux, $We_{Gc} = \rho_g U_{max}^2 D_{gc} / \sigma = 10$, où D_{gc} correspond au diamètre critique d'une goutte. Les gouttes ne sont plus supposées s'atomiser en dessous de cette valeur sous l'effet de l'écoulement gazeux. En considérant $D_{gc} \simeq \Delta_x$, les auteurs trouvent ainsi un compromis permettant de rester dans un régime d'atomisation, avec une valeur de $\sigma = 0.06 \text{ N.m}$ et $U_{max} = 100 \text{ m.s}^{-1}$.

Paramètres	Symbole/Unité	Valeurs
Masse volumique gaz	$\rho_g (\text{kg.m}^{-3})$	25
Masse volumique liquide	$\rho_l (\text{kg.m}^{-3})$	696
Viscosité gaz	$\mu_g (\text{kg.m}^{-1}\text{s}^{-1})$	1×10^{-5}
Viscosité liquide	$\mu_l (\text{kg.m}^{-1}\text{s}^{-1})$	1.18×10^{-3}
Tension de surface	$\sigma (\text{N.m}^{-1})$	0.06
Diamètre d'injection	$D_0 (\mu\text{m})$	100
Vitesse débitante	$U_d (\text{m.s}^{-1})$	79
Reynolds liquide	Re_l	4659
Weber liquide	We_l	7239
Intensité de turbulence	$u'u'/U^2$	0.05
Echelle caractéristique de turbulence	$L_t (\text{m})$	$0.1 D_0$

TABLE 3.1 – Paramètres des simulations.

Zones d'études Les tests de sous maille ont été conduits au sein de 3 zones d'études, représentées sur la figure 3.12. Proche injecteur en zone 1, en milieu de jet en zone 2 et à la fin du domaine de calcul, dans la zone 3. La décision d'utiliser ces 3 zones d'études a été motivée par 2 raisons qui se révèlent concordantes. D'une part, au regard de la taille du domaine de calcul, diviser celui-ci en 3 a permis d'effectuer des analyses plus rapides. D'autre part, les 3 zones d'études définies ici présentent des caractéristiques différentes, tant en terme de turbulence qu'en terme d'interface liquide/gaz, ce qui est visible sur la figure 3.13(a) et (b) où est tracée l'interface liquide/gaz pour la zone 1 et 3, respectivement. En effet, le jet dans la zone 1 est soumis à un fort cisaillement de vitesse au niveau de l'interface, la colonne liquide est encore présente et peu de gouttes se sont formées. *A contrario*, en zone 3, le champ de vitesse est plus homogène et on relève une présence importante de gouttes et de structures liquides détachées de petites dimensions spatiales. La zone 2 constitue alors une zone intermédiaire entre ces 2 dernières.

Dans l'idéal, un modèle LES doit être capable de rendre compte de l'écoulement dans les 3 zones, si ce n'est pas le cas on pourra alors discriminer quelle zone constitue une

Zones	Localisation	Description	Dimension
zone 1	$0 - 3D_0$	Zone d'injection : Présence d'une colonne liquide, symétrie cylindrique, peu de gouttes	$l_x = 300\mu m$, maillage : 256^3
zone 2	$9 - 12D_0$	Zone centrale : Cœur liquide encore présent, gouttes + ligaments	<i>idem</i>
zone 3	$17 - 20D_0$	Zone atomisée : Présence majoritaire de gouttes et ligaments	<i>idem</i>

TABLE 3.2 – Localisation et intérêt des zones d'études.

difficulté pour une modélisation LES. À des fins de clarté, la localisation, les différences et les dimensions spatiales des 3 zones sont présentées sur le tableau 3.2.

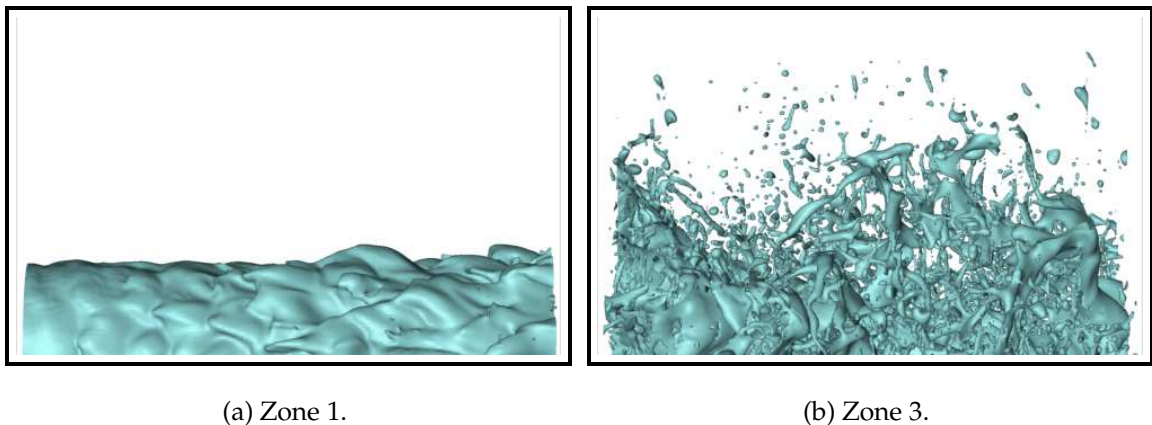


FIGURE 3.13 – Visualisation de l'interface liquide/gaz du jet DNS pour la zone 1 (a) et 3 (b). Sens de l'écoulement : de la gauche vers la droite.

Il convient de préciser que notre étude est non seulement limitée à 3 zones spatiales relativement restreintes vis-à-vis de la totalité du jet, mais également limitée à 5 pas de temps consécutifs pour un jet pleinement développé. Ceci est dû au fait que les pas de temps ont une taille mémoire conséquente mais aussi que peu de résultats de calculs étaient disponibles et « relancer » un calcul DNS aurait pris beaucoup de temps. Il faut donc rester conscient que les tests que nous allons mener se situent donc à un instant donné, t , pour le jet développé comme sur la figure 3.10. En outre aucune statistique temporelle ne peut être obtenue du fait des capacités actuelles des calculateurs.

3.5.2.3 Étude sur les grandeurs turbulentes

Avant de conduire les analyses *a priori*, il nous est apparu judicieux de mener une étude sur les grandeurs turbulentes du jet DNS. Ceci va permettre de mettre en lumière

l'intérêt des zones à étudier dans la suite et également de déterminer quelles valeurs de tailles de filtre, $\bar{\Delta}$, il est possible de considérer, dans ce cas physique précis.

Énergie cinétique turbulente et dissipation On va donc, dans cette section, s'intéresser à 2 grandeurs classiques en turbulence, à savoir l'énergie cinétique turbulente et la dissipation, notées k_e et ε respectivement.

Formellement, on définit à partir du champ de vecteur de vitesse, $\vec{u}$, le vecteur des fluctuations, $\vec{u}'$, au sens de Reynolds, soit dans la direction i :

$$u'_i = u_i - \langle u_i \rangle , \quad (3.104)$$

où $\langle \bullet \rangle$ définit l'opérateur moyenne de Reynolds. L'énergie cinétique turbulente, k_e , est alors définie comme :

$$k_e = \frac{1}{2} \langle u'_i u'_i \rangle , \quad (3.105)$$

et la dissipation, ε , avec :

$$\varepsilon = \nu \langle \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \rangle . \quad (3.106)$$

Un problème est apparu très vite dans la mesure où l'on ne dispose pas de suffisamment de pas de temps issus de la DNS afin d'obtenir une moyenne de Reynolds, $\langle u_i \rangle$, convergée en temps. On propose cependant d'utiliser l'aspect cylindrique du problème afin d'estimer $\langle u_i \rangle$ sur une couronne comprise entre r et $r + dr$, avec $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, telle que :

$$\langle u_i \rangle(r, z) = \frac{1}{l_r} \int_r^{r+l_r} u_i(x, y, z) dr . \quad (3.107)$$

Sur la figure 3.14 l'énergie cinétique turbulente, ainsi que la dissipation moyenne sont tracées en fonction du rayon r/r_0 au milieu des 3 zones d'études présentées précédemment, afin d'en observer l'évolution le long de l'injection. Proche injecteur, l'énergie cinétique turbulente (figure 3.14(a)) présente un profil courant avec un pic à l'endroit où le cisaillement de vitesse est maximum. Dans cette configuration cela correspond à la position de l'interface en $r/r_0 = 1$, avec ici $r_0 = D_0/2$. Plus loin, le jet se déstabilise. Des structures turbulentes se développent et le niveau global de l'énergie cinétique turbulente augmente. La zone centrale et atomisée produisent ainsi plus d'énergie turbulente. Dans ces parties du domaine, il est possible d'observer une homogénéisation de la turbulence dans la direction radiale. De façon similaire, à cause de l'effet de cisaillement, le taux de dissipation (3.14(b)) présente un pic dans la zone d'injection. Cependant, le niveau de dissipation diminue dans la direction de l'écoulement, alors que le profil radial s'élargit à cause de la déstabilisation du jet et de l'atomisation. La fin du domaine de calcul correspondant à la fin de l'atomisation du cœur liquide, celui-ci est trop court pour observer la diminution de l'énergie. En conséquence de quoi, le niveau de dissipation reste bas dans cette zone.

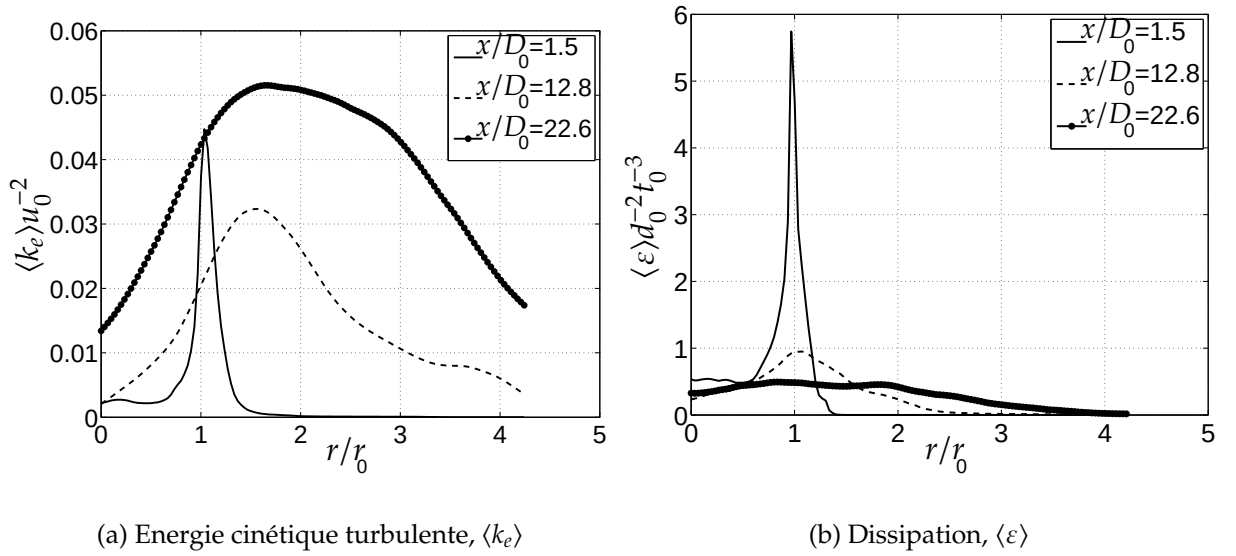


FIGURE 3.14 – Propriété turbulente du jet DNS, moyenne radiale. Pour 3 positions : 1.5, 12.8 et $22.6D_0$

Spectre d'énergie turbulente du jet d'atomisation Il est également possible d'obtenir, à partir des champs DNS, le spectre de l'énergie cinétique turbulente du jet. Ce spectre est important dans la mesure où il peut nous renseigner sur la distribution de l'énergie entre les tourbillons de taille et de fréquences différentes. En outre, on cherche à savoir si la turbulence est bien développée et si on peut détecter la présence d'une zone inertielle. On propose de tracer la répartition de l'énergie associée à un nombre d'onde k pour chaque zone (1, 2 & 3). On rappelle succinctement, ici, la façon d'obtenir ce spectre, néanmoins, le lecteur intéressé pourra se reporter au livre de Pope [101] très bien documenté en la matière.

Techniquement, pour obtenir le spectre, il faut évaluer la puissance spectrale du tenseur spectral des vitesses, ϕ_{ij} défini comme :

$$\phi_{ij} = \langle \check{u}'_i \check{u}'_j \rangle , \quad (3.108)$$

où $\check{u}'_i$ correspond à la transformée de Fourier de u'_i . Cette transformée donne un champ tridimensionnel dans l'espace des nombres d'ondes (k_1, k_2, k_3) . Si bien que $E(k)$ est définie comme l'énergie des fluctuations contenues dans une couronne sphérique, Θ_k , de rayon k et d'épaisseur élémentaire dk . Le niveau d'énergie cinétique turbulente, correspondant au nombre d'onde k est alors obtenu avec :

$$E(k) = \frac{1}{2} \int_{\Theta_k} \phi_{ii} d\Theta_k , \quad (3.109)$$

où $d\Theta_k = 4\pi k^2 dk$ est un volume élémentaire d'intégration. La figure 3.15 schématise la situation qui permet de passer de la vision spectrale 3D à un spectre d'énergie turbulente 1D. L'énergie contenue dans la couronne sphérique entre Θ_k et $\Theta_k + d\Theta_k$,

dans l'espace des phases, correspond au niveau d'énergie, $E(k)$ à la fréquence k sur une épaisseur dk , sur le spectre 1D.

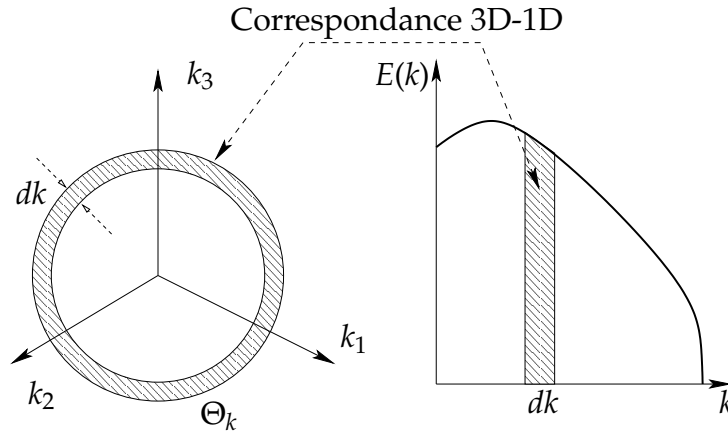


FIGURE 3.15 – Correspondance entre l'espace spectral 3D et le spectre 1D.

On applique donc cette procédure pour les zones 1,2 et 3. Les spectres obtenus sont visibles sur la figure 3.16, où sont tracées les énergies $E(k)$, normalisées par E_{max} , la valeur maximale relevée pour les 3 cas, en fonction du nombre d'onde normalisé $kL/2\pi$, avec L la longueur du domaine de calcul.

Proche injecteur, la turbulence n'est pas pleinement développée (zone 1), mais rapidement une zone inertielle apparaît (zones 2 et 3). La pente de cette zone inertielle respecte bien le résultat classique de la théorie de Kolmogorov en $k^{-5/3}$, également tracé sur la figure 3.16. Ces résultats permettent d'estimer quelles longueurs de coupure, $\bar{\Delta}$, sont utilisables. En outre, on estime que, pour la zone 3, la longueur de coupure maximale est de $\bar{\Delta} = 14\Delta_x$, avec Δ_x la taille de la maille DNS. En effet, cette longueur de coupure se trouve à la limite de la zone inertielle. Comme on peut l'observer sur la figure 3.16, où la fréquence correspondante à cette longueur de coupure, k_{14} est symbolisée en trait continu gras (rouge).

De plus, si l'on souhaite utiliser un modèle de sous maille requérant l'utilisation d'un filtre test, de taille $\hat{\Delta}$, comme pour la procédure dynamique de Germano, il convient de faire attention à ce que la coupure correspondante dans le spectre ait lieu dans la zone inertielle. Dans le cas contraire le risque est de sortir des limites de validité des modèles. Ceci impose donc, $\hat{\Delta}_{max} = 14\Delta_x$, pour ce cas précis d'atomisation. Or, on prend la plupart du temps pour la coupure test, $\hat{\Delta} = \alpha\bar{\Delta}$ avec $\alpha = 2$. Ce qui signifie dans ce cas que la taille maximale du filtre implicite LES est telle que, $\bar{\Delta}_{max} = 7\Delta_x$.

En pratique on prendra, $\bar{\Delta}_{max} = 2$ ou $4\Delta_x$, afin de s'éloigner de cette fréquence de coupure maximale, k_{14} , que nous avons estimée. Clairement, ceci va permettre d'utiliser des maillages 2 à 4 fois moins raffinés que le cas DNS, ceci correspondant à des maillages $128^2 \times 1024$ et $64^2 \times 512$ respectivement. Ce qui laisse présager que le coût numérique va diminuer de manière sensible par rapport au cas DNS de référence, conservant ainsi le principal intérêt de la LES.

Pour la suite, on testera donc les modèles avec 2 tailles de filtres, soit $\bar{\Delta}_5 = 5\Delta$ et $\bar{\Delta}_{13} = 13\Delta_x$ afin de tester les limites des modèles.

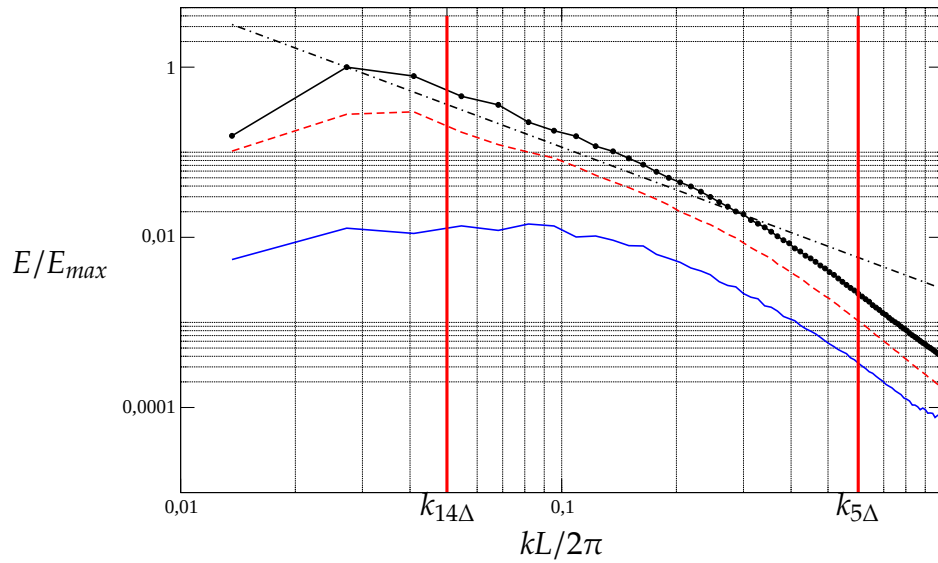


FIGURE 3.16 – Spectre d'énergie cinétique. Ligne droite (tiret-point) : $E = k^{-5/3}$, continue : zone proche injecteur (1), tiret : zone centrale (2), symboles : zone atomisée (3).

3.5.2.4 Effet de l'opération de filtrage sur la fonction indicatrice de phase

L'application de l'opérateur de convolution sur les champs DNS va nous permettre de mettre en lumière quelques points importants. En effet, en observant la figure 3.10 plusieurs questions se posent concernant la capacité d'un modèle LES à reproduire ce type d'écoulement. Par exemple, la capacité de la LES à capturer les instabilités initiales du jet, on encore les ruptures des ligaments.

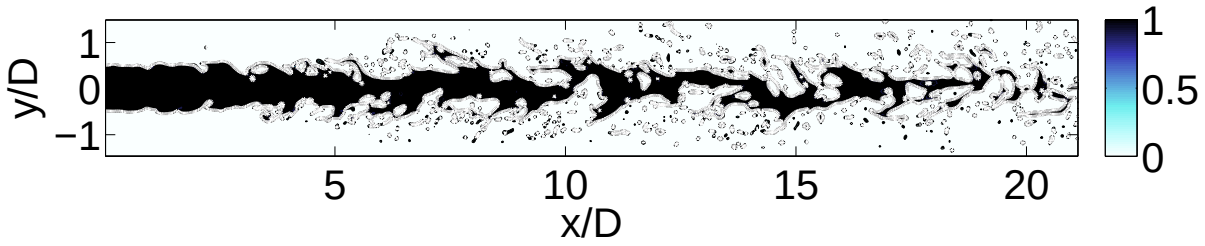
En outre, on attend d'un modèle d'atomisation, quel que soit le formalisme utilisé, qu'il décrive les caractéristiques du spray en aval de l'injecteur, au moins de façon statistique. Principalement en terme de taille de gouttes et en distribution de vitesse. Or, on se rend compte en observant la figure 3.10 présentant le jet DNS, que les gouttes les plus petites ne vont pas pouvoir être caractérisées directement par le maillage en LES.

Pour s'en convaincre on peut appliquer un filtre boîte, au champ DNS de la fonction indicatrice de phase χ afin d'observer quelles informations il serait possible d'obtenir d'une LES d'atomisation. Pour ce faire 2 tailles de filtre ont été utilisées :

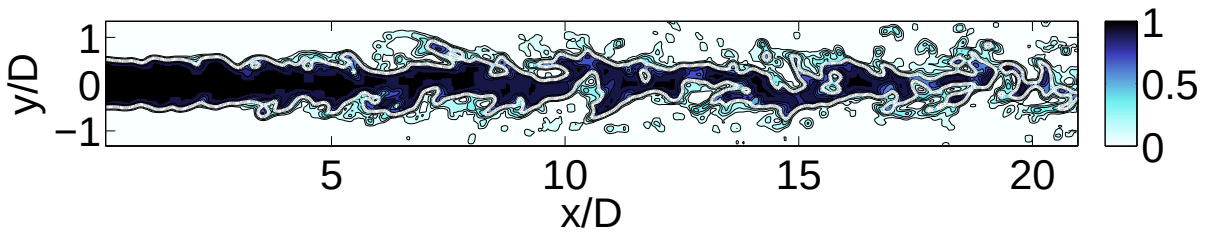
1. Une petite taille de filtre que l'on repéra par SFS (*Small Filter Size*), telle que : $\overline{\Delta}_5 = 5\Delta$.
2. Une taille de filtre plus grande LFS (*Large Filter Size*) : $\overline{\Delta}_{13} = 13\Delta_x$,

avec dans les 2 cas Δ défini comme la taille monodimensionnelle d'une maille dans le cas DNS. La figure 3.17 présente une coupe de la fonction χ et $\overline{\chi}$ dans la direction axiale du jet : DNS (3.17(a)), filtré : SFS (3.17(b)) et LFS (3.17(c)). Sur le champ DNS (3.17(a)) on peut voir la présence des instabilités primaires du jet ainsi que des gouttes et des ligaments (qui par ailleurs correspondent à ce que l'on peut voir sur la figure 3.10). Avec la simple application d'une opération de filtrage, la distinction nette des ces petites structures disparaît et est remplacée par un champ lisse et continu. Sur la figure 3.17, dans les 3 cas, la ligne blanche représente la position de l'iso-0.5 de fraction de volume qui peut

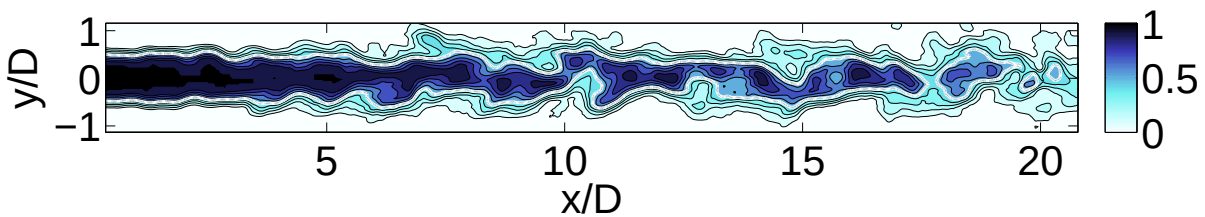
être vue comme l'interface qui serait défini dans le cas d'une simulation aux grandes échelles. Un des problèmes clé de la LES diphasique est clairement exposé sur cette figure. En effet, l'interface n'est représentée ici que par les plus grandes échelles, si bien qu'à cause du filtrage implicite provoqué par le maillage, l'interface n'est plus capable de rendre compte de la description et de l'évolution complète de la phase liquide. En outre il est visible, en comparant les figures 3.17(a) et 3.17(c), que certaines structures visibles sur le champ DNS, notamment des gouttes, ont complètement disparues de la vision résolue pour le cas LFS.



(a) Champ DNS.



(b) Champ filtré, $\bar{\Delta} = 5\Delta$.



(c) Champ filtré, $\bar{\Delta} = 13\Delta$.

FIGURE 3.17 – Impact de l'opération de filtrage sur un champ de fraction de volume, dans la direction de l'écoulement. (a) : champ DNS, (b): SFS $\bar{\Delta} = 5\Delta$ et (c) : LFS $\bar{\Delta} = 13\Delta$. Les lignes blanches représentent la position de l'interface filtrée.

Ce point est clairement visible aussi sur la figure 3.18, où sont tracées les masses volumiques pour plusieurs coupes dans le plan xy perpendiculaire au plan d'injection z . Et ce, pour 3 positions d'intérêt : zone d'injection, centrale et atomisée. La première ligne, 3.18 (a), (b) et (c) représente la masse volumique obtenue dans le cas DNS. Dans

ce travail elle est considérée comme une représentation exacte de la solution recherchée. La 2^{ème} ligne, 3.18 (d), (e) et (f), représente la masse volumique définie à partir de la fonction indicatrice de phase lissée, telle que :

$$\bar{\rho}(\bar{\chi}) = \overline{(1 - \chi)\rho_g + \chi\rho_l} . \quad (3.110)$$

On remarque que beaucoup d'informations subsistent et des indices de la présence des ligaments et des gouttes sont toujours visibles, même si l'information sur la géométrie et la topologie de ces structures semble perdue. *A contrario*, on peut également chercher à obtenir une vision discontinue de l'interface, à l'instar des méthodes DNS, en utilisant, par exemple :

$$\bar{\rho}(\varepsilon) = (1 - \varepsilon)\rho_g + \varepsilon\rho_l , \quad (3.111)$$

avec ε une fonction indicatrice de phase reconstruite à partir des grandes échelles, grâce à une fonction d'Heavyside $\mathcal{H}$:

$$\varepsilon = \mathcal{H}\left(\frac{1}{2} - \bar{\chi}\right) = \begin{cases} 1 & \text{si } \bar{\chi} > 1/2 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.112)$$

Cette masse volumique reconstruite, $\bar{\rho}(\varepsilon)$, est visible sur les figures 3.18 (g), (h) et (i). On voit clairement en comparant avec les champs DNS initiaux, (a), (b) et (c) de cette même figure, que beaucoup de structures disparaissent de la vision résolue et ne peuvent pas être décrites par cette interface relative aux grandes échelles. De plus, on peut noter ici que la formulation 3.111, correspond à un choix arbitraire qui consiste à représenter l'interface résolue comme correspondant à une valeur de $\bar{\chi}$ valant 1/2. En outre, on peut montrer que la plupart du temps, pour cette formulation :

$$\oint_{\Omega} \bar{\rho}(\bar{\chi}) dv \neq \oint_{\Omega} \bar{\rho}(\varepsilon) dv , \quad (3.113)$$

avec Ω un volume de contrôle. Dans son travail de thèse Toutant [126], qui cherche à garder une vision discontinue de l'interface, montre que cette dernière relation n'est vraie que si l'interface est un plan.

Il montre, entre autre, un effet non négligeable de la courbure de l'interface initiale (soit κ DNS). Etant donné que 3.110 est une formulation conservative en masse, ceci revient à dire que la formulation 3.111 ne l'est pas. Cette dernière observation implique donc 2 remarques si l'on tient à conserver une vision discontinue de l'interface en LES, en utilisant le formalisme VOF ou level-set :

- I Soit on arrive à définir une formulation de $\bar{\rho}$ conservative mais discontinue, auquel cas on ne pourra pas décrire des structures dont les dimensions sont trop petites. Plus précisément, lorsque la dimension la plus petite de cette interface est inférieure à la taille du filtre, $\bar{\Delta}$. Il y aura donc un effet de « sous-résolution » des structures liquides.
- II Soit la formulation de $\bar{\rho}$ est non conservative, comme 3.111. Il faut alors ajouter une contribution afin de rendre compte des structures de sous maille.

Dans le cas I, Toutant [126] arrive à se prémunir de l'effet de « sous résolution » en faisant en sorte que son maillage LES soit toujours à même de décrire les plus petites inclusions de l'interface. Ce qui clairement ne sera pas notre cas, ce que l'on peut observer *a priori* sur la figure 3.17 (b) et (c). On caractérisera d'ailleurs cet effet *a posteriori* dans le chapitre 4.

Pour le cas II, il faudrait, par exemple, définir une nouvelle variable Eulérienne de sous maille, ρ_{SGS} , afin rejoindre la formulation 3.110, telle que :

$$\bar{\rho}(\bar{\chi}) = \bar{\rho}(\varepsilon) + \rho_{SGS} . \quad (3.114)$$

Cette « masse volumique » de sous maille est tracée sur les figures 3.18 (j), (k) et (l). En effet, ici la composition de ces champs avec (g), (h) et (i) permettent d'obtenir (d), (e) et (f) respectivement. Cependant il est probable que dans ce cas il faudrait développer pour ρ_{SGS} une équation de transport et définir les termes d'échanges entre ce dernier et la masse volumique définie aux échelles résolues.

À la vue des tests conduits dans cette section, la vision continue 3.110 se profile alors comme la solution la plus simple afin de décrire la dispersion moyenne du liquide.

3.5.3 Hiérarchisation des termes de sous maille

L'objectif de cette section est d'évaluer l'ordre de grandeur des termes de sous maille présent dans les équations de transport en LES. Ce type d'étude a été conduit dans le cas liquide/gaz par Labourasse *et al* [59], avec une configuration de gouttes dans un champ turbulent, mais également par Vincent *et al* [135] pour un cas d'inversion de phases (huile/eau). Dans les 2 cas, ces études *a priori* ont permis d'estimer quels termes sont négligeables face à la contribution totale. On propose donc de conduire le même type d'étude mais cette fois appliquée au jet liquide d'atomisation.

3.5.3.1 Généralités

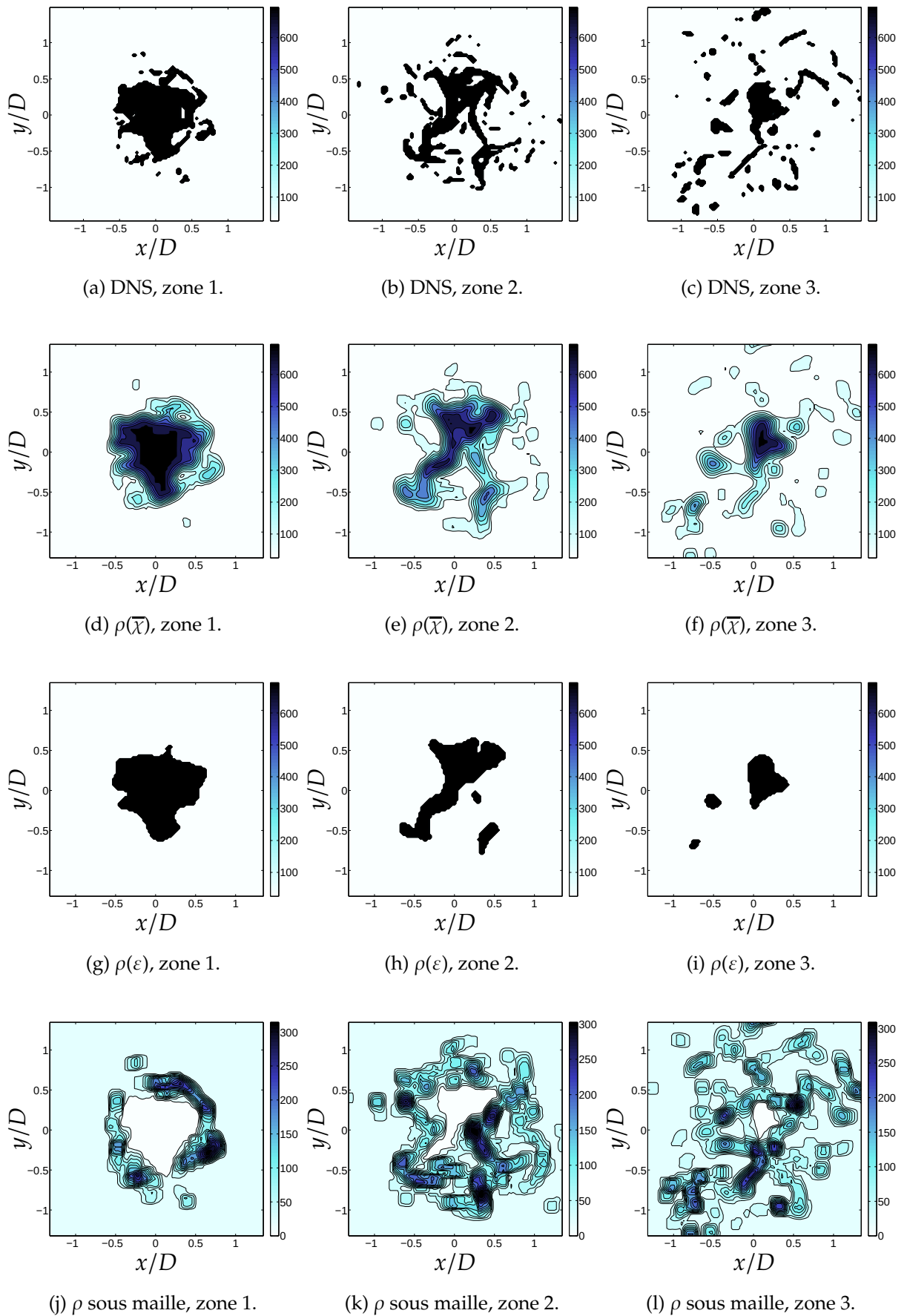
Considérant la symétrie cylindrique du problème, on propose d'effectuer des moyennes radiales afin de réaliser la comparaison des différentes contributions. Un opérateur de moyenne radiale sur une couronne cylindrique à été employé pour une variable $A(x, y, z)$, défini comme :

$$\langle A(r_0, z_0) \rangle = \frac{1}{r_0 l_r l_z} \int_{r_0}^{r_0+l_r} \int_{z_0-l_z/2}^{z_0+l_z/2} A r dr dz , \quad \text{où } r = \sqrt{x^2 + y^2} , \quad (3.115)$$

où l_z est défini comme une longueur d'analyse dans la direction longitudinale⁴, et l_r dans la direction radiale (ou transverse).

De la même manière on peut également définir un opérateur moyenne radiale mais cette fois conditionné par la présence de l'interface :

4. Notons que cet opérateur n'est pas identique à celui de l'équation 3.107 où la longueur d'analyse l_z n'était pas présente.

FIGURE 3.18 – Masses volumiques ρ et $\bar{\rho}$ sur des coupes xy en zone 1,2 et 3.

$$\langle A(r_0, z_0) \rangle^\Gamma = \frac{\int_{r_0}^{r_0+l_r} \int_{z_0-l_z/2}^{z_0+l_z/2} A \delta_\Gamma r dr dz}{\int_r^{r+l_r} \int_{z_0-l_z/2}^{z_0+l_z/2} \delta_\Gamma r dr dz}, \quad (3.116)$$

si l'aire interfaciale mesurée, $\int_r^{r+l_r} \int_{z_0-l_z/2}^{z_0+l_z/2} \delta_\Gamma r dr dz$ est non nulle.

3.5.3.2 Contribution de l'énergie cinétique de sous maille

En appliquant l'opération de filtrage sur le champ de vecteur vitesse, il est possible de déterminer la proportion de l'énergie cinétique totale, k , en comparaison de l'énergie cinétique résolue notée $\bar{k}$. À partir de la DNS nous extrayons, $\langle k \rangle$ et $\langle \bar{k} \rangle$. Et ce pour les 2 tailles de filtres sélectionnés, SFS : $\bar{\Delta}_5$ et LFS : $\bar{\Delta}_{13}$. Les résultats sont tracés sur la figure 3.19(a) et (b) dans les zones 1 et 3 respectivement. Près du nez de l'injecteur, 3.19(a), on peut observer que la plus petite proportion d'énergie résolue se situe dans la phase liquide pour $r/r_0 < 1$. En effet la phase gazeuse, près du nez de l'injecteur, est relativement calme et une énergie quasiment nulle y est mesurée (c.f. figure 3.14(a)). Dans la phase liquide, même si la proportion d'énergie reste faible devant le pic présent à l'interface, le mouvement fluctuant est tout de même important, car il participe à la déstabilisation du jet et l'atomisation. Si le filtre SFS est appliqué, environ 80% de la quantité d'énergie est résolue près de l'injecteur (3.19(a)) et atteint plus de 90% loin de celui-ci. Cela confirme en partie que le filtre SFS est un filtre approprié à des fins d'analyse *a priori*, mais surtout que c'est la taille minimale du filtre que l'on peut envisager d'utiliser dans la mesure où une grande partie de l'énergie est résolue.

D'un autre côté, l'application du filtre LFS ($\bar{\Delta}_{13} = 13\Delta_x$) montre que seul 20% de l'énergie est résolue au centre du jet liquide (c.f. figure 3.19(a)) en début d'injection. En cause, les structures turbulentes les plus grandes restent plus petites que la taille du filtre LFS considéré. Après l'injection, le jet subi une expansion et la taille des structures augmente, dans la phase liquide (où $r/r_0 < 1$). En conséquence de quoi, l'énergie résolue augmente de 20% à 50%. À cause de la présence de l'interface, une chute soudaine de la proportion d'énergie résolue peut être observée, soit 20% en $r/r_0 = 1$. Après cette chute la proportion augmente de façon rapide jusqu'à 100% dans la phase gazeuse ($r/r_0 > 1$), ceci est dû aux conditions plus calmes qui règnent loin de la zone de cisaillement. Loin dans l'injection (figure 3.19(b) en zone 3), toujours pour le filtre LFS, il est possible d'observer que l'écoulement s'homogénéise dans la direction radiale et la proportion d'énergie cinétique résolue est environ de 60%.

Au final, il est possible de faire une première remarque concernant les tailles constantes des filtres sélectionnés, $\bar{\Delta}_5$ et $\bar{\Delta}_{13}$. En effet, pour ce dernier, le modèle de sous maille devrait être capable de rendre compte d'une grande proportion de l'énergie non résolue, et surtout dont la répartition est très inhomogène au sein de l'écoulement : de plus de 80% dans la phase liquide, près de l'injecteur, à moins de 40% après l'atomisation. Cette disparité dans la proportion d'énergie non résolue implique donc une double contrainte sur la taille du filtre pour ce type d'écoulement. Il doit être situé dans la zone inertielle de la turbulence et il doit être capable de capturer une large gamme d'échelles turbulentes. Il est à noter que les mêmes conclusions ont été établies dans

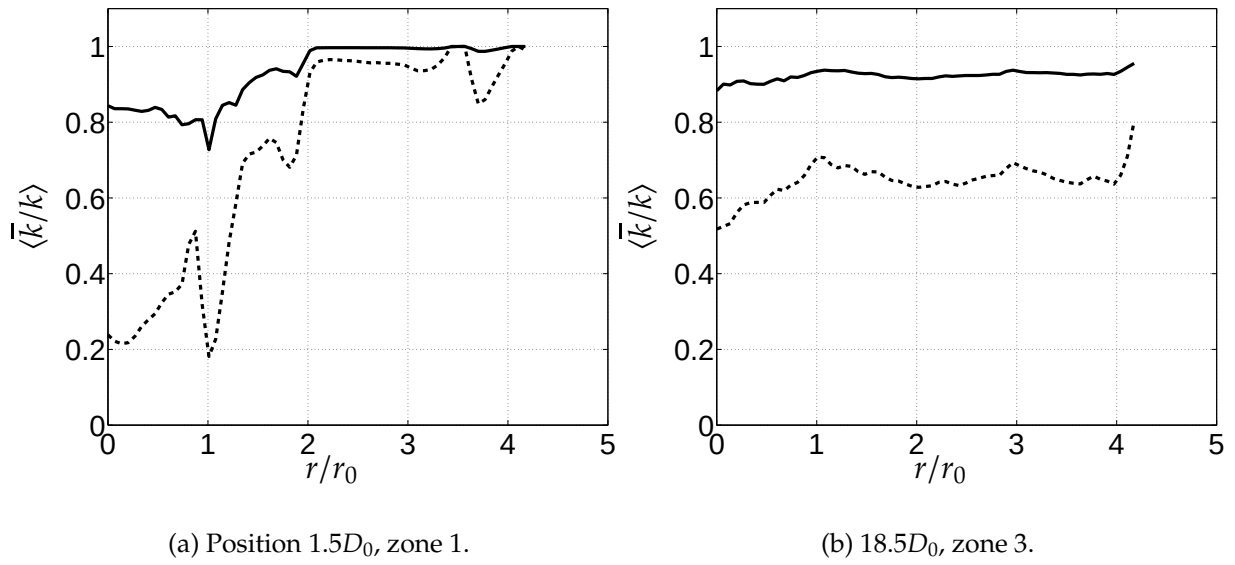


FIGURE 3.19 – Ratio entre l'énergie cinétique turbulente résolue $\bar{k}$ et l'énergie turbulente totale k , moyenne radiale. Continue : $\bar{\Delta} = 5\Delta$, tiret : $\bar{\Delta} = 13\Delta$.

le cas de jets purement gazeux, où une répartition similaire de l'énergie résolue a été trouvée, de la zone d'injection à la zone loin de l'injecteur. Il a également été montré que la LES était capable dans ces cas monophasique, de bien capturer cette répartition d'énergie, comme par exemple dans les travaux de Wang *et al* [138] dans le cas de jets ronds gazeux.

Cependant, il faut garder en tête que dans le cas du jet liquide/gaz les perturbations dans le liquide influencent de façon significative le phénomène d'atomisation et au final, la distribution et la répartition spatiale des gouttes. En outre, la chute brutale de la proportion d'énergie résolue proche de l'interface montre que les petites échelles ont une influence significative dans cette zone.

3.5.3.3 Contribution des termes de sous maille de l'équation de bilan de la quantité de mouvement

Dans cette section, on considère les contributions des termes de sous maille présents dans l'équation de la quantité de mouvement, donnée par l'équation 3.61. On cherche à quantifier et hiérarchiser ces termes de sous maille pour l'atomisation. Partant du jet DNS on applique donc l'opération de moyenne radiale 3.115 afin d'obtenir :

Le terme temporel moyen	: $\langle \partial \tau_{\rho u_i} / \partial t \rangle$,
le terme convectif moyen	: $\langle \partial \tau_{\rho u_i u_j} / \partial x_j \rangle$,
le terme diffusif moyen	: $\langle \partial \tau_{D_{ij}} / \partial x_j \rangle$,
et le terme de tension de surface moyen	: $\langle \tau_{\sigma_i} \rangle^\Gamma$.

La moyenne du dernier terme prend en compte la présence de l'interface, en utilisant la moyenne conditionnée, équation 3.116. Ces contributions sont ainsi tracées sur la

figure 3.20, proche injecteur (zone 1) et également loin de celui-ci (zone 3). L'axe des ordonnées est en échelle $\log$. En premier lieu, il est possible de remarquer qu'à l'instar de l'énergie cinétique turbulente, l'écoulement est fortement inhomogène dans la direction radiale proche injecteur. Cependant, à mesure que le phénomène d'atomisation a lieu, les profils s'uniformisent, ce qui est visible sur les figures 3.20(b) et (d) au sein de la dernière zone. Quel que soit l'endroit où l'on se trouve dans la direction de l'écoulement, la hiérarchie des différents termes de sous maille reste la même. Les termes temporel et convectif ont la contribution la plus forte. La contribution du terme diffusif est plus faible, avec plusieurs ordres de grandeurs de différence avec ces 2 derniers. Enfin, le terme interfacial possède la contribution la plus faible, même en comparaison avec le terme diffusif.

Il est à remarquer que cette hiérarchie des termes de sous maille de l'équation de transport de la quantité de mouvement est identique à celle observée précédemment par Labourasse *et al* [59] dans le cadre d'écoulement de bulles déformées par des tourbillons contrarotatifs. Dans leurs études, les auteurs pensent que le fort niveau du terme temporel doit être dû à l'utilisation d'une dérivation temporelle d'ordre faible. En effet ces derniers utilisent un schéma d'Euler à l'ordre 1, pour tester, *a priori*, ce terme. Ici et afin de vérifier cette hypothèse, un schéma de dérivation d'ordre 4 en temps a été utilisé pour nos tests. Ceci étant possible dans la mesure où l'on dispose de 5 pas de temps issus de la DNS. Cependant les conclusions restent identiques et on peut alors supposer que l'ordre de grandeur élevé du terme temporel n'est pas une conséquence de l'ordre du schéma de dérivation temporel. En outre, Labourasse *et al* [59] remarquent que l'augmentation de l'ordre de grandeur du terme temporel est directement corrélé avec la déformation de la bulle : plus celle-ci est distordue (où plutôt courbée), plus le terme de sous maille temporel est élevé. Dans la configuration que l'on cherche à tester, l'interface liquide/gaz subit des déformations bien plus importantes que dans le cas de Labourasse *et al* [59]. En conséquence de quoi, le terme temporel reste élevé quelle que soit la zone testée. En fait, plus l'interface liquide/gaz est déformée plus il est possible, localement, d'observer une évolution brutale de la masse volumique au niveau de sous maille. Et, à cause du rapport de masse volumique entre les phases liquide et gaz, une petite modification de la position de l'interface peut mener à une modification importante du terme temporel qui, par définition, représente la corrélation de sous maille entre le champ de vitesse et la masse volumique.

Des exemples de champs du terme convectif sont tracés sur la figure 3.21 avec le filtre LFS, $\bar{\Delta}_{13}$. Ces champs présentent des coupes dans la direction longitudinale et transverse dans la zone 1, proche injecteur. Les figures 3.21(a) et (b) illustrent la corrélation transverse/longitudinale $\tau_{\rho u_2 u_3}$ et 3.21(b) et (d) la corrélation transverse/transverse $\tau_{\rho u_2 u_2}$. Il est clairement visible que le terme de sous maille convectif apparaît principalement autour de l'interface liquide/gaz filtrée (ligne noire). C'est également l'endroit où le gradient atteint son niveau le plus élevé. Ainsi ces champs instantanés permettent de montrer que la présence de l'interface liquide/gaz influe de façon significative sur le tenseur de sous maille. Il en va de même pour les autres termes de sous maille. Pour le terme convectif cela s'explique par 2 raisons : D'une part, à cause du cisaillement de vitesse à l'interface, proche injecteur. En effet il existe une corrélation non nulle

pour les vitesses non résolues, $u_i u_j$ à l'interface. D'autre part, à cause du rapport de masse volumique existant à l'interface, point évoqué plus haut. Les termes temporel et diffusif sont exclusivement influencés par les sauts de grandeurs physiques à travers l'interface, dans la mesure où ces termes rendent compte de la corrélation de ρ et μ avec le champ de vitesse. Pour finir, le terme de tension de surface est, quant à lui, naturellement influencé par l'interface. En effet, vu la forme mathématique de ce dernier : $\tau_{\sigma_i} = \overline{\sigma \kappa n_i \delta_\Gamma}$, il n'est en fait défini qu'à l'interface.

Les tests conduits dans cette section permettent au final de hiérarchiser les termes de sous maille. On relève, pour le cas de l'atomisation liquide/gaz DNS testé, quelle que soit la zone (1, 2 ou 3) :

$$\left\langle \frac{\partial \tau_{\rho u_i}}{\partial t} \right\rangle > \left\langle \frac{\partial \tau_{\rho u_i u_j}}{\partial x_j} \right\rangle >> \left\langle \frac{\partial \tau_{D_{ij}}}{\partial x_j} \right\rangle >> \langle \tau_{\sigma_i} \rangle^\Gamma . \quad (3.117)$$

Discussion sur le terme de tension de surface : Comme cela a déjà été mentionné, le terme interfacial revêt un caractère particulier dans la mesure où ce terme n'est défini qu'à l'interface de sous maille. On tient alors à nuancer ici les résultats obtenus pour le terme interfacial τ_{σ_i} . En effet, la structure des autres termes de sous maille est constituée d'une partie de sous maille, clairement non fermée, à laquelle on retranche la partie résolue. Ainsi, dans un premier temps, on pourrait être tenté de définir le terme interfacial de la même manière, on note cette décomposition $\tau_{\sigma_i}^\star$:

$$\tau_{\sigma_i}^\star = \overline{\sigma \kappa n_i \delta_\Gamma} - \sigma \overline{\kappa} \overline{n_i} \overline{\delta_\Gamma} . \quad (3.118)$$

Dans ce cas, il est alors possible de réécrire l'équation de transport de la quantité de mouvement 3.61 comme :

$$\frac{\partial \overline{\rho} \overline{u_i} + \tau_{\rho u_i}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho} \overline{u_i} \overline{u_j} + \tau_{\rho u_i u_j}}{\partial x_j} = - \frac{\partial \overline{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial \overline{D_{ij}} + \tau_{D_{ij}}}{\partial x_j} - \sigma \overline{\kappa} \overline{n_i} \overline{\delta_\Gamma} - \tau_{\sigma_i}^\star . \quad (3.119)$$

Dans l'idéal il faudrait alors comparer $\tau_{\sigma_i}^\star$ avec les autres termes de sous maille dans cette dernière relation. Cependant, la partie résolue de ce terme (*i.e.* $\sigma \overline{\kappa} \overline{n_i} \overline{\delta_\Gamma}$) nous paraît mal définie.

On ne sait pas, *a priori*, à quelle interface (résolue) les termes $\overline{n_i}$ et $\overline{\kappa}$ font référence. En effet, pour rappel 3.40 nous donne $\partial \chi_k / \partial x_i = -n_i^k \delta_\Gamma$, où la normale dans cette relation n'est définie qu'à la condition que l'interface soit détectée (d'où la présence de δ_Γ). Il est alors difficile de donner un sens à $\overline{n_i}$, dans la mesure où dans la relation 3.118, $\overline{\delta_\Gamma}$ n'est pas une valeur discrète centrée sur cette interface mais constitue la réponse impulsionnelle du filtre. Ceci est illustré sur la figure 3.22 en 1D où la présence de 2 interfaces au sein du volume de convolution rend floue la notion d'interface résolue ou « équivalente » (3.22(b)).

D'autant plus que la relation 3.40 filtrée donne :

$$\frac{\partial \overline{\chi_k}}{\partial x_i} = -\overline{n_i^k \delta_\Gamma} , \quad (3.120)$$

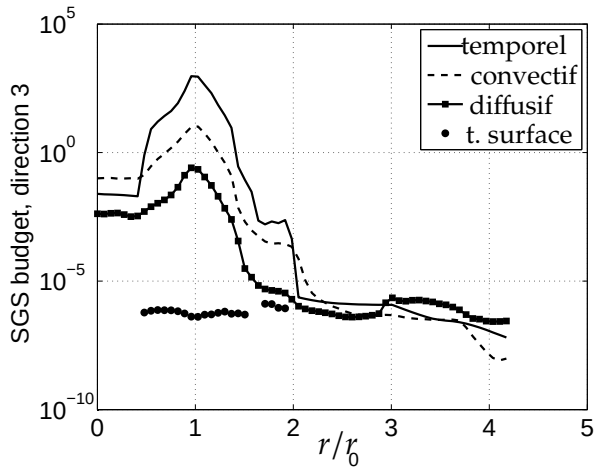
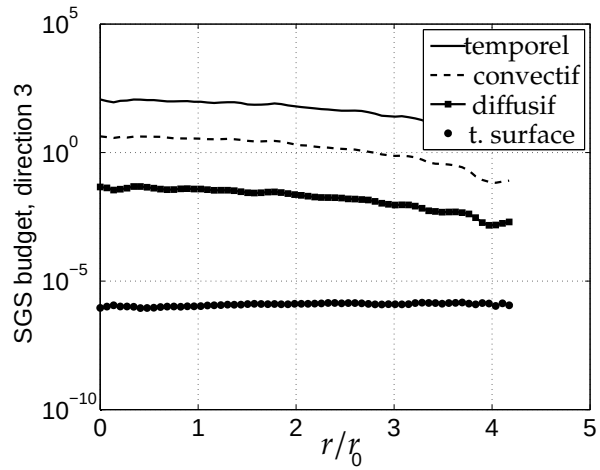
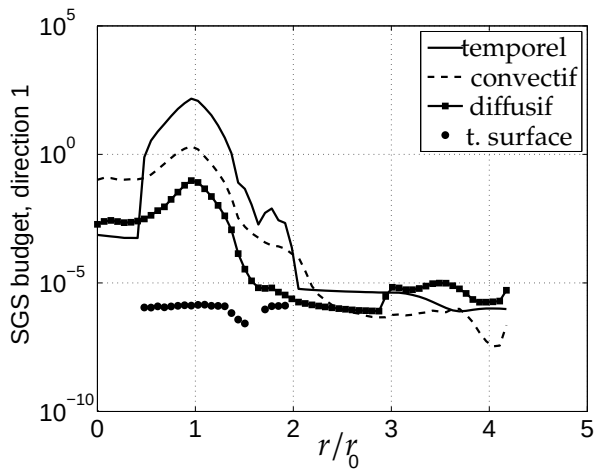
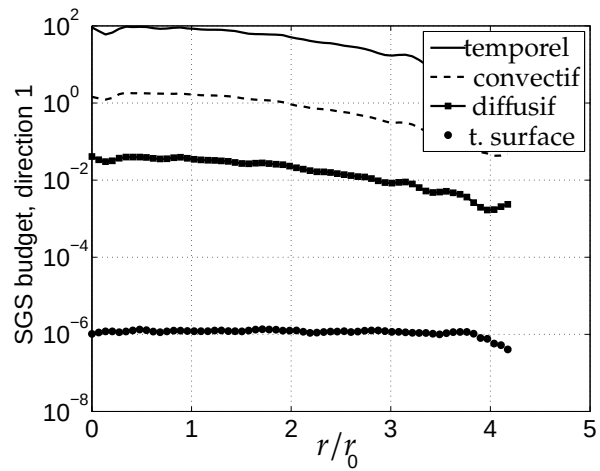
(a) Direction axiale, position $5D_0$ (b) Direction axiale, position $20D_0$ (c) Direction transverse, position $5D_0$ (d) Direction transverse, position $20D_0$

FIGURE 3.20 – Contributions des différents termes de sous maille pour l'équation des moments. $\overline{\Delta} = 5\Delta$. Échelle $\log$.

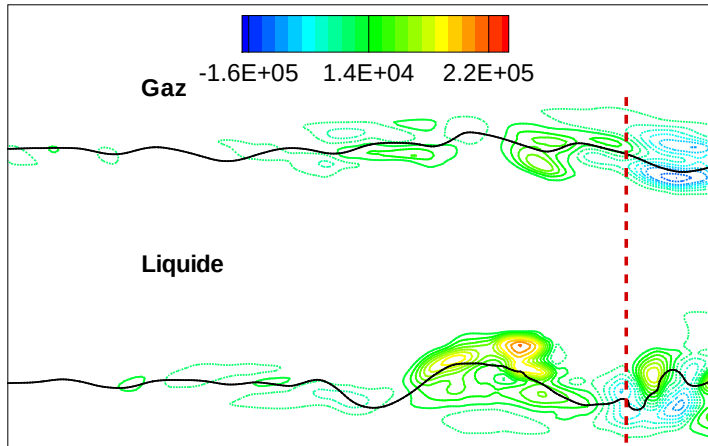
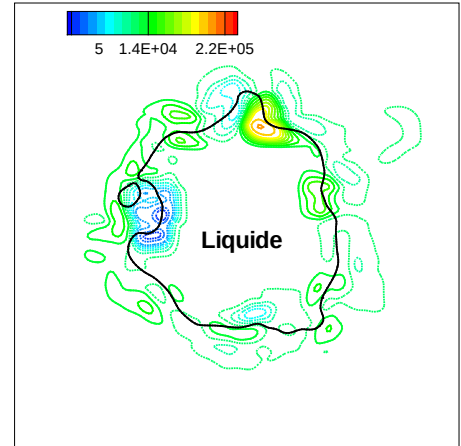
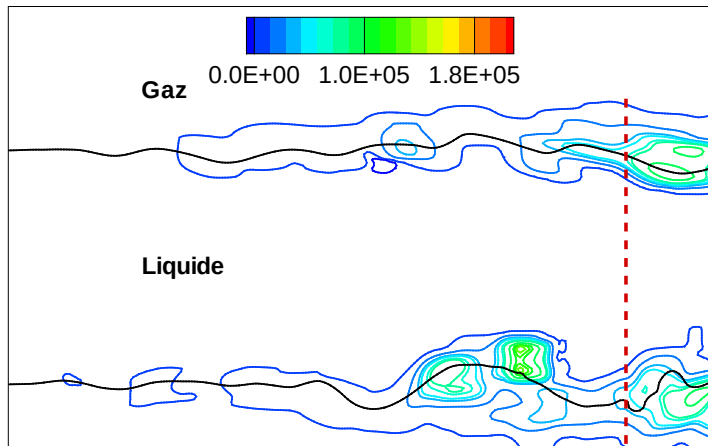
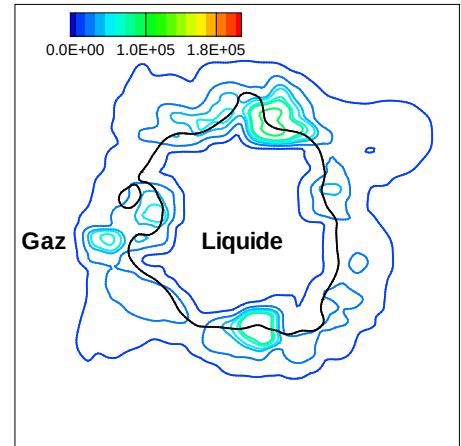
(a) $\tau_{\rho u_2 u_3}$, zone injection 1.(b) $\tau_{\rho u_2 u_3}$, coupe selon un plan xy .(c) $\tau_{\rho u_2 u_2}$, zone injection 1.(d) $\tau_{\rho u_2 u_2}$, coupe selon un plan xy .

FIGURE 3.21 – Estimation des contributions de sous maille pour le terme convectif $\tau_{\rho u_i u_j}$. ligne noire : contour de l'interface filtrée, couleurs : isovaleurs du terme de sous maille convectif. (b) et (d) présentent une coupe dans le plan xy réalisée sur la droite pointillée rouge (visible en (a) et (c)).

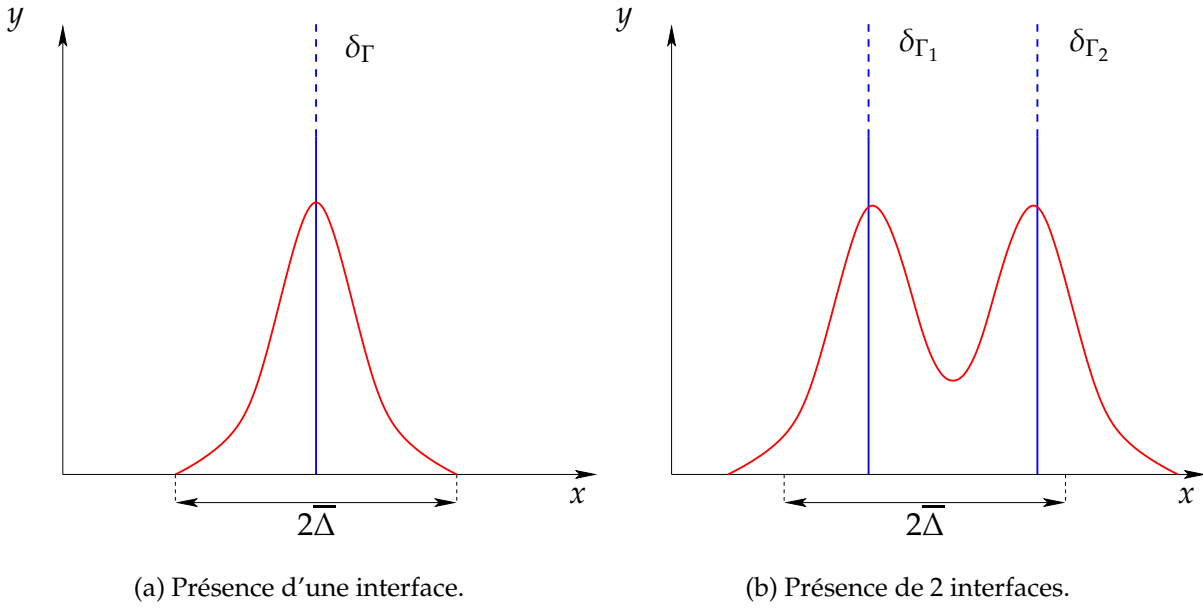


FIGURE 3.22 – Exemple de la réponse impulsionnelle d'un filtre Gaussien. En (a) une seule interface réside au sein du support du noyau de convolution (ici $2\bar{\Delta}$), en (b) le support contient 2 interfaces. Les informations relatives à ces interfaces peuvent alors être confondues sur l'épaisseur $2\bar{\Delta}$.

on voit alors que la connaissance de la fonction de phase filtrée ne permet pas d'obtenir directement l'interface résolue où équivalente. Ces différentes remarques expliquent pourquoi nous avons préféré tester la contribution totale τ_{σ_i} plutôt que le terme de sous maille $\tau_{\sigma_i}^\star$. Il se trouve que cette contribution totale semble négligeable devant les autres termes de sous maille présents dans l'équation de bilan de la quantité de mouvement dans le cas de l'atomisation.

Néanmoins, il est possible, dans le cas de l'atomisation, que la tension de surface joue un rôle aux grandes échelles sur la déstabilisation du cœur liquide proche injecteur, surtout en début d'injection. Ce qui clairement ne peut pas être observé avec les tests de sous maille tels que nous les avons conduits étant donné que l'on ne dispose pas d'une durée de simulation suffisante pour cela.

Cependant, on peut tenter de prendre en compte la force de tension de surface $\vec{f}_\sigma$ dans l'équation de bilan de la quantité de mouvement seulement pour les grandes échelles. Celle-ci s'exprimant alors dans la direction i :

$$\begin{cases} f_{\sigma_i} = \sigma \bar{\kappa}' \bar{n}_i' \bar{\delta}_\Gamma' & \text{si l'interface est bien résolue aux grandes échelles,} \\ f_{\sigma_i} = 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (3.121)$$

(•) exprimant le fait que l'on se rapporte à une interface résolue, $\bar{\delta}_\Gamma'$ est alors un pic de Dirac centré sur cette interface et $\bar{\kappa}'$ sa courbure. Le plus difficile est de définir un critère rendant compte si l'interface est bien résolue aux grandes échelles. Plusieurs solutions sont envisageables :

- En première approximation il est possible de prendre l'iso-0.5 de la fonction de phase filtrée, $\bar{\chi}$.
- Une estimation de la norme du gradient de $\bar{\chi}$ pourrait également permettre d'estimer si l'interface est bien résolue au niveaux de la maille de calcul. En effet, considérant que cette fonction est bornée entre 0 et 1, si :

$$|\nabla \bar{\chi}| \simeq O\left(\frac{1}{\Delta}\right), \quad (3.122)$$

alors elle présente un profil raide qui peut indiquer que l'interface est bien résolue.

- Une autre solution pourrait être d'utiliser la vision discontinue des interfaces en LES développée par Toutant [126] durant sa thèse et utilisant les développements asymptotiques raccordés.
- Une quantité d'aire interfaciale, $1/V \oint_V \delta_s dv$, proche de la quantité d'interface minimale que l'on peut trouver au sein du volume du noyau de convolution ($V = \bar{\Delta}^3$) peut également indiquer que l'interface est bien résolue au niveau du filtre. Pour cela, il faudrait se munir d'une équation de transport de la quantité d'aire interfaciale et trouver une relation pour la quantité minimale de cette variable au sein d'un volume de contrôle. Nous aborderons d'ailleurs ces 2 points lors du développement d'un modèle LES d'atomisation au chapitre 4.

3.5.3.4 Contribution relative du terme de sous maille de l'équation bilan de la fonction de phase

A l'instar de la section précédente on va vouloir évaluer, à partir de la DNS, la contribution du terme de sous maille, τ_χ , présent dans l'équation de transport de la fonction indicatrice de phase (c.f. equation 3.63). Pour ce faire, on propose de la comparer avec le terme résolu de cette même équation de transport, soit $\partial \bar{u}_i \bar{\chi}_k / \partial x_i$. L'opération de moyenne radiale, équation 3.115, est également appliquée pour obtenir :

$$\text{le terme de convection résolu moyen} : \langle \bar{u}_i \frac{\partial \bar{\chi}_k}{\partial x_i} \rangle, \quad (3.123)$$

$$\text{le terme de sous maille moyen associé} : \langle \tau_\chi \rangle = \overline{\langle u_i \frac{\partial \chi_k}{\partial x_i} - \bar{u}_i \frac{\partial \bar{\chi}_k}{\partial x_i} \rangle}. \quad (3.124)$$

On décide de tracer ces moyennes en fonction du rayon r/r_0 , avec $\chi_k = \chi_l$. Les contributions ont été adimensionnées par D_0/U_d . Ainsi, la figure 3.23 présente la comparaison de ces 2 termes en zone 1 (a) et 3 (b) pour une taille de filtre de $\bar{\Delta}_5$. Les figures 3.23(c) et (d) présentent les mêmes courbes avec $\bar{\Delta}_{13}$. En zone 1, on peut remarquer un pic des contributions résolues et de sous maille au niveau de l'interface en $r/r_0 = 1$. Ceci est une fois de plus imputable au fort cisaillement de vitesse au niveau de celle-ci mais aussi au gradient de la fonction de phase χ_k . En zone 3, cette distribution a tendance à s'uniformiser, à l'instar des termes de sous maille de l'équation de transport de la quantité de mouvement dans la section précédente.

Pour une taille de filtre de $\bar{\Delta}_5$ la contribution de sous maille est systématiquement inférieure à la partie résolue, mais n'est pas négligeable puisque celle-ci atteint environ 10% de la partie résolue. On rappelle que $\bar{\Delta}_5$ constitue la taille de filtre minimale envisageable en pratique. Au delà de cette taille cette proportion sera supérieure et ne pourra pas être négligée. Par exemple, en utilisant $\bar{\Delta}_{13}$ cette proportion augmente, dans la mesure où plus d'échelles sont à résoudre. Il est même à noter qu'en zone 1, dans la phase liquide, la contribution de sous maille est plus importante que la contribution résolue.

Au final, pour le point qui nous intéresse ici on peut noter que, quelle que soit la zone d'étude et la taille du filtre, la contribution de sous maille du terme interfacial ne peut être négligée. Il va donc falloir également modéliser ce terme. Toutant [126] dans ces travaux de thèse relève également une valeur d'environ 10% entre la contribution de sous maille et la contribution résolue de ce terme dans le cas de bulles, dans son cas la modélisation de similarité d'échelles donne de bons résultats avec les tests *a priori*. Dans la suite nous chercherons donc à savoir si ce modèle s'applique également dans le cas de notre écoulement.

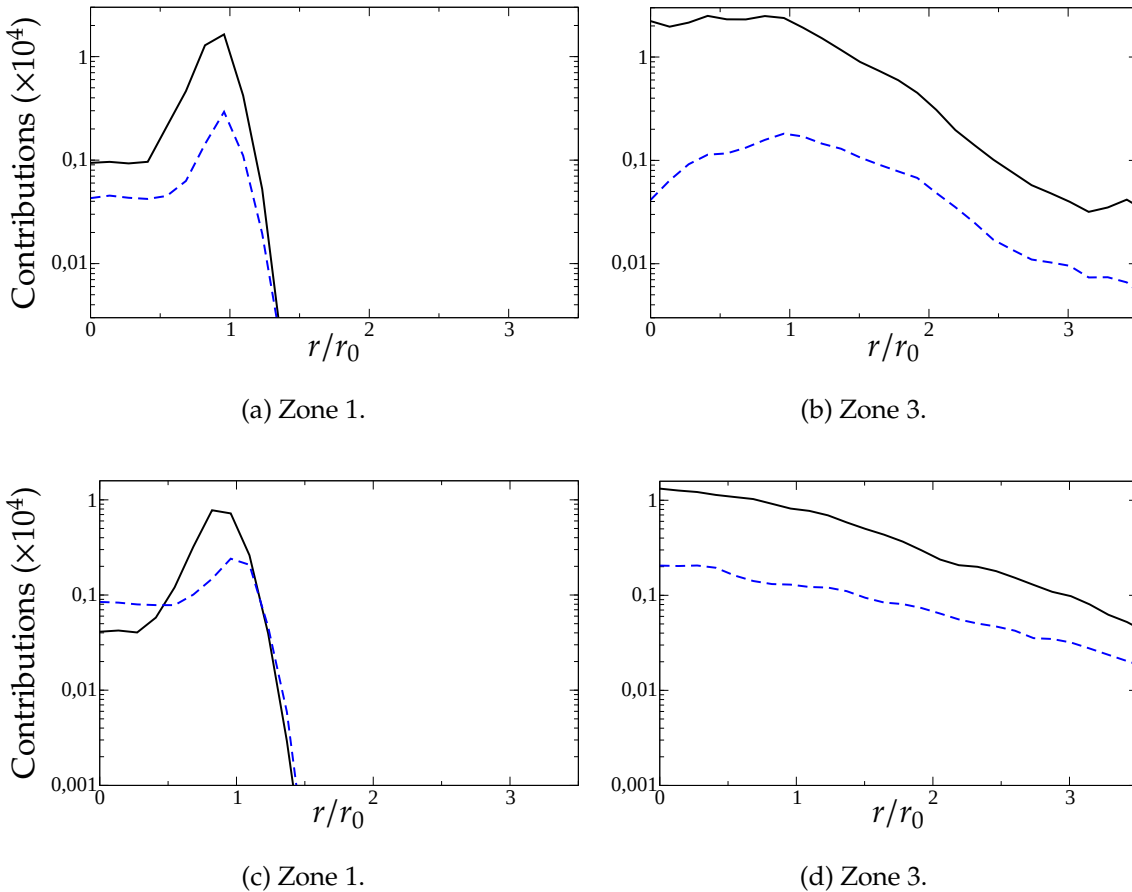


FIGURE 3.23 – Comparaison des contributions résolues $\partial \bar{u}_i \bar{\chi} / \partial x_i$ (lignes continues) et de sous maille τ_χ (lignes pointillées) pour l'équation de l'interface, pour les zone 1 (a) et 3 (b) pour $\bar{\Delta} = 5\Delta_x$, zone 1 (c) et 3 (d) pour $\bar{\Delta} = 13\Delta_x$.

3.5.4 Tests des modèles de sous maille

Après avoir déterminé que les termes de sous maille convectif et temporel sont prépondérants au sein de l'équation de transport de la quantité de mouvement dans ce type d'écoulement, dans cette section on propose de tester les modélisations de sous maille à partir des champs de données DNS. On souhaite également tester ces modélisations avec le terme interfacial, τ_χ , dans la mesure où nous avons vu que sa contribution était importante par rapport au terme résolu. Les 2 modèles détaillés dans la partie 3.4 vont être testés. Le modèle de Smagorinsky avec un coefficient C_s constant, d'une part, et avec la procédure dynamique, d'autre part. Puis finalement, le modèle de similarité d'échelles. En premier lieu et afin de rester clair, on définit les notations utilisées d'une manière générale et les tests que l'on souhaite mener. Ensuite, on proposera un critère permettant de discriminer les modèles entre eux. Enfin, on discutera des résultats obtenus dans ce cadre.

3.5.4.1 Notations et expressions des contributions de sous maille et des modèles associés

On détaille ici l'expression mathématique des modèles testés dans le cadre de ces tests *a priori*. On s'appuie pour cela sur les modèles présentés dans la section 3.4.1. On décide tester la contribution totale des termes de sous maille au sein des équations de transport. C'est-à-dire, que l'on va comparer la divergence dans la direction i des termes de sous maille exacts et modèles. En effet, il apparait que les contributions des termes de sous maille dans les équations de transport s'écrivent de manière générale :

$$\Lambda_i = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} = \frac{\partial \overline{\alpha_i \beta_j} - \bar{\alpha}_i \bar{\beta}_j}{\partial x_j}, \quad (3.125)$$

avec $\vec{\alpha}$ et $\vec{\beta}$ des vecteurs de variables hydrodynamiques quelconques, Λ_i est alors la contribution de τ_{ij} dans la direction i . Ce qui est, par exemple, la forme de la contribution de sous maille convective, $\partial \tau_{\rho u_i u_j} / \partial x_j$, dans l'équation de transport de la quantité de mouvement. De façon générique, en reprenant la notation de l'équation 3.125, on notera dans la suite τ_{ij} le terme exact et τ_{ij}^m la modélisation du tenseur de sous maille τ_{ij} . On note alors, respectivement, Λ_i et Λ_i^m les contributions exactes et modélisées de la façon suivante :

$$\Lambda_i = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}, \quad (3.126)$$

$$\Lambda_i^m = \frac{\partial \tau_{ij}^m}{\partial x_j}. \quad (3.127)$$

On rappelle ainsi les expressions exactes des termes que l'on cherche à modéliser avec le système de notations utilisé :

- Contribution de sous maille du terme convectif, C_i :

$$C_i = \frac{\overline{\partial \rho u_i u_j} - \bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} . \quad (3.128)$$

- Contribution de sous maille du terme temporel, T_i :

$$T_i = \frac{\overline{\partial \rho u_i} - \bar{\rho} \bar{u}_i}{\partial t} . \quad (3.129)$$

- Contribution de sous maille du terme interfacial, Π :

$$\Pi = \overline{u_i \frac{\partial \chi}{\partial x_i}} - \bar{u}_i \overline{\frac{\partial \chi}{\partial x_i}} . \quad (3.130)$$

Il est à noter que cette dernière contribution, Π , n'a pas de notion directionnelle dans la mesure où elle provient de l'équation de transport de la fonction de phase, celle-ci est donc un scalaire. Néanmoins, nous continuerons à utiliser la notation générique donnée par la relation 3.125, mais en ignorant l'indice directionnel.

Modèle de Smagorinsky : Ce modèle a été développé initialement pour le terme convectif de l'équation de transport de la quantité de mouvement, $\tau_{\rho u_i u_j}$, on propose donc de tester la modélisation pour ce terme en premier. La modélisation de la contribution de ce terme s'écrit alors, selon la direction i :

$$C_i^m \simeq -2 \frac{\partial C_s \bar{\rho} \bar{\Delta}^2 |\bar{S}| \bar{S}_{ij}}{\partial x_j} . \quad (3.131)$$

Dans la suite, on utilisera dans un premier temps une valeur constante du coefficient C_s , puis la procédure dynamique.

Modèle de similarité d'échelles : On rappelle ici l'expression du modèle de similarité d'échelles pour les différents termes de sous maille que l'on cherche à tester :

- Terme de sous maille convectif

$$C_i^m = C_c \left(\frac{\overline{\partial \bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j} - \bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} \right) . \quad (3.132)$$

- Terme de sous maille temporel

$$T_i^m = C_t \left(\frac{\overline{\partial \bar{\rho} \bar{u}_i} - \bar{\rho} \bar{u}_i}{\partial t} \right) . \quad (3.133)$$

- Terme interfacial :

$$\Pi^m = C_\chi \left(\overline{\bar{u}_i \frac{\partial \chi}{\partial x_i}} - \bar{u}_i \overline{\frac{\partial \chi}{\partial x_i}} \right) . \quad (3.134)$$

Adimensionnalisation : Dans la suite les résultats seront toujours présentés sans dimensions, ainsi il convient de choisir un coefficient permettant d'adimensionner chaque terme que nous voulons calculer. On exprime ici la forme des contributions exactes sans dimensions :

$$^*C_i = C_i \gamma , \quad (3.135)$$

$$^*T_i = T_i \gamma , \quad (3.136)$$

$$^*\Pi = \Pi \xi . \quad (3.137)$$

Les termes convectif et temporel étant tout deux issus de l'équation de transport de la quantité de mouvement on les adimensionne alors par le même coefficient, $\gamma = D_0/\rho_l U_d^2$. La contribution de sous maille pour la fonction de phase, Π est quand à elle multipliée par le coefficient, $\xi = D_0/U_d$. Pour rappel, D_0 est le diamètre de sortie de l'injecteur et U_d sa vitesse débitante et ρ_l la masse volumique du liquide. Les modélisations sont adimensionnées de la même façon .

Aussi, et afin d'alléger l'écriture dans la suite, on confondra les notations sans dimensions avec celles dimensionnelles, par exemple C_i avec $^*C_i$. Les graphiques et les résultats qui vont être montrés, seront par conséquent systématiquement sans dimensions, sauf mention contraire.

3.5.4.2 Résultats préliminaires pour le modèle de similarité d'échelles & discussion

Sur les figures 3.24, 3.25 et 3.26 des coupes dans le plan xy réalisées dans la zone 1 au même instant, les contributions des termes de sous maille $\partial\tau_{\rho u_3 u_j}/\partial x_j$, $\partial\tau_{\rho u_3}/\partial t$ et τ_χ sont tracées. Les 3 graphiques présentent en (a) la contribution réelle et en (b) la modélisation de ce dernier avec le modèle de similarité d'échelles.

Si l'on s'intéresse, dans un premier temps, aux contributions réelles, on note bien que les termes temporel et interfacial sont effectivement nuls loin de l'interface (figures 3.25(a) et 3.26(a)). En revanche, le terme convectif n'est pas nul loin de l'interface, bien que cela ne soit pas visible sur la figure 3.24 à cause de l'échelle de couleur utilisée. En effet, dans la zone où la coupe a été réalisée, ce terme est bien plus élevé autour de l'interface qu'au sein des phases. Ceci s'expliquant par le fait que le gradient de masse volumique filtrée est maximal à l'interface, mais également parce que le cisaillement de vitesse est maximal dans cette zone (c.f. figures 3.14(a) et (b)).

En comparant, sur les figures 3.24, 3.25 et 3.26, les contributions exactes (a) et modélisées (b) on se rend compte que le modèle de similarité d'échelles semble bien reproduire la contribution réelle. Néanmoins des différences plus ou moins importantes subsistent et il est difficile de les distinguer sur ces coupes. Différences visibles sur la figure 3.27 où les profils de la contribution du terme convectif exacte et modélisée sont tracées, pour la direction axiale, 3.27(a), et transverse, 3.27(b). Sur ces figures il est effectivement visible que les contributions du terme convectif, dans ces 2 directions, ne sont pas nulles loin de l'interface, même si leurs valeurs sont effectivement maximales près de celle-ci (*i.e.* en $|r/D_0| \approx 0.5$ dans cette zone). On voit également que le modèle de similarité d'échelles peine à reproduire ce niveau maximal autour de l'interface et subit,

par exemple pour la direction axiale, des fluctuations qui n'apparaissent pas pour la contribution exacte. La contribution dans la direction transverse semble, quant à elle, mieux modélisée dans cette zone.

On conclut à ce point que la simple observation des champs exacts et modèles, tels que sur les figures 3.24, 3.25 et 3.26 ne suffit pas dans la mesure où l'on ne peut estimer la précision des différents modèles. Même si ces figures permettent déjà d'observer que le modèle de similarité d'échelles semble, au premier abord, capable de reproduire la contribution de sous maille. Ainsi, une étude complémentaire est nécessaire.

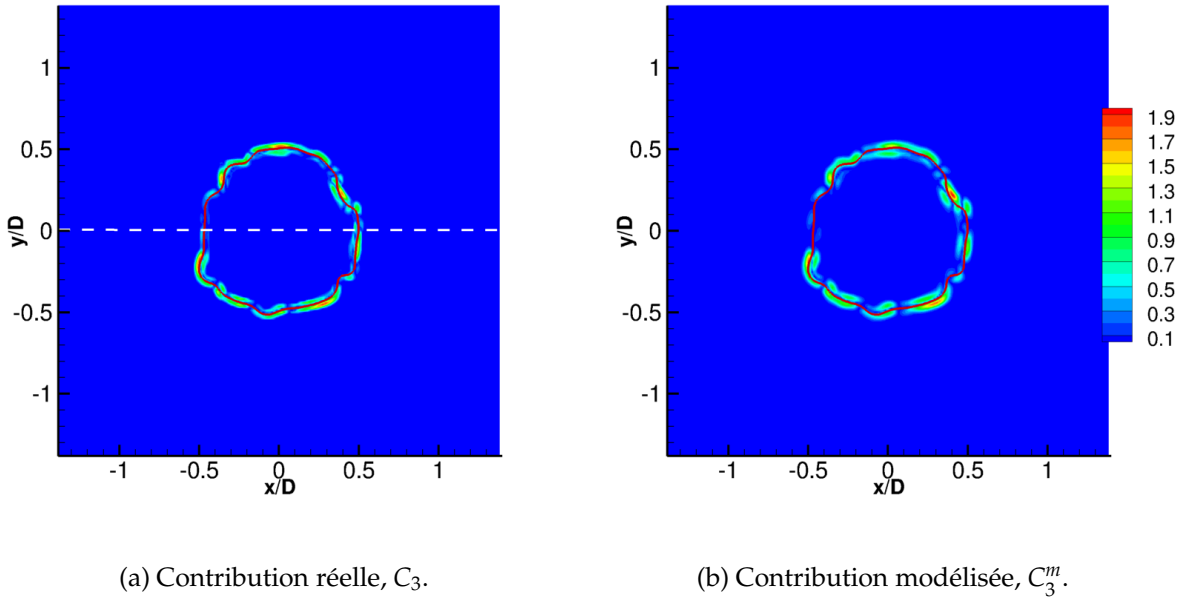


FIGURE 3.24 – Coupe dans le plan xy en zone 1 de la contribution de sous maille du terme convectif $\partial\tau_{\rho u_3 u_j}/\partial x_j$. Terme réel, C_3 , en (a), modélisation, C_3^m , en (b) avec le modèle de similarité d'échelles, $\bar{\Delta} = 5\Delta_x$.

3.5.4.3 Étude complémentaire

Afin d'affiner quelque peu cette première analyse, on propose de tracer un diagramme de dispersion (ou *scatter plot*) de la contribution modèle en fonction de la contribution réelle de chacun des termes de sous maille dans chaque zone d'étude définie, à l'instar de Labourasse *et al* [59] qui ont réalisé ce type d'études *a priori*.

Diagrammes de dispersion Un diagramme de dispersion consiste à tracer $\Lambda_i^m = f(\Lambda_i)$. Alors, plus le tracé est proche d'une droite d'équation $y = Cst x$, où Cst est une constante, plus le modèle est correct. Dans l'idéal, si le modèle représentait exactement la contribution réelle, on aurait $Cst = 1$ sans aucune dispersion autour de la droite, situation représentée sur l'exemple de la figure 3.28(a). *A contrario*, si le modèle présente des

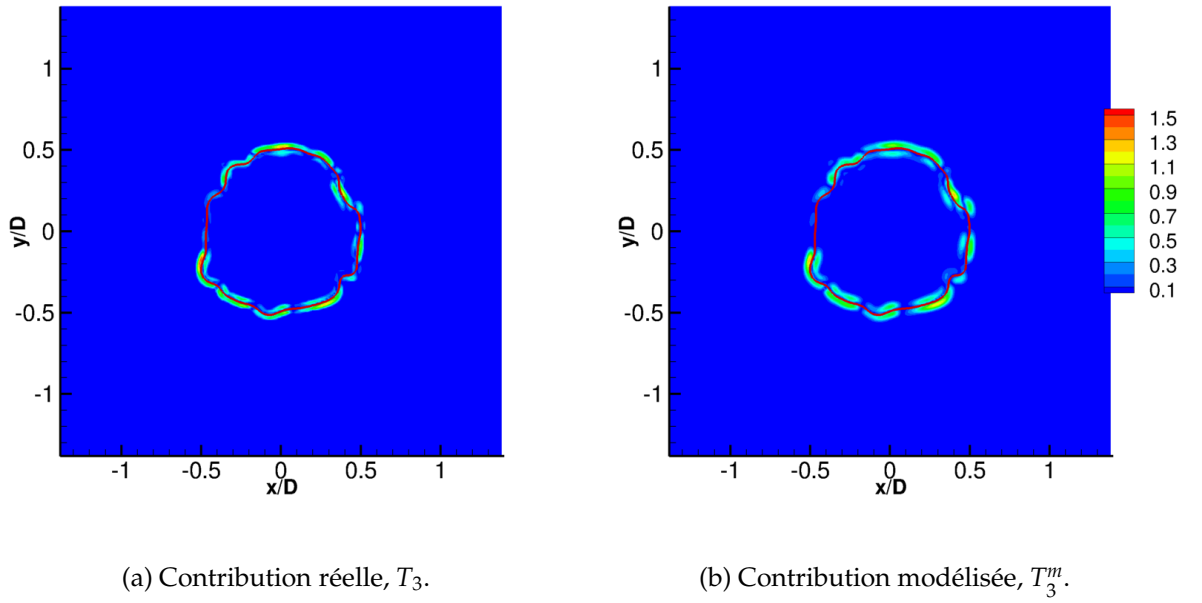


FIGURE 3.25 – Coupe dans le plan xy en zone 1 de la contribution de sous maille du terme temporel $\partial\tau_{\rho u_3}/\partial t$. Terme réel, T_3 en (a), modélisation T_3^m en (b) avec le modèle de similarité d'échelles, $\bar{\Delta} = 5\Delta_x$.

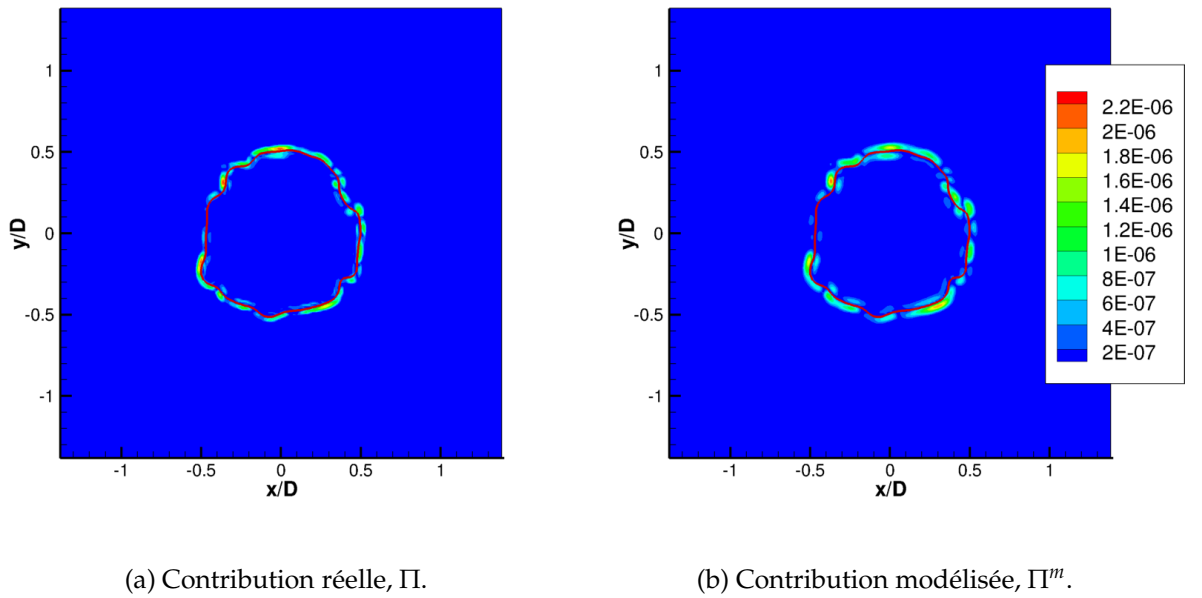


FIGURE 3.26 – Coupe dans le plan xy en zone 1 de la contribution de sous maille du terme de l'équation de la fonction de phase τ_χ . Terme réel, Π en (a), modélisation, Π^m en (b) avec le modèle de similarité d'échelles, $\bar{\Delta} = 5\Delta_x$.

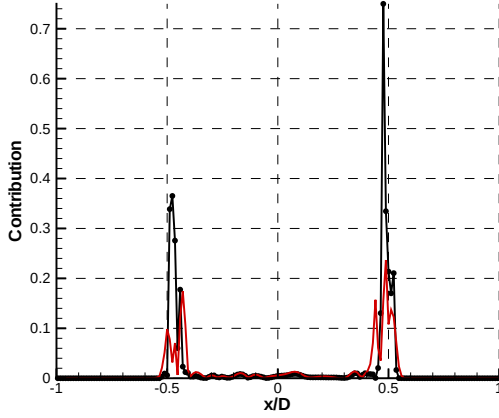
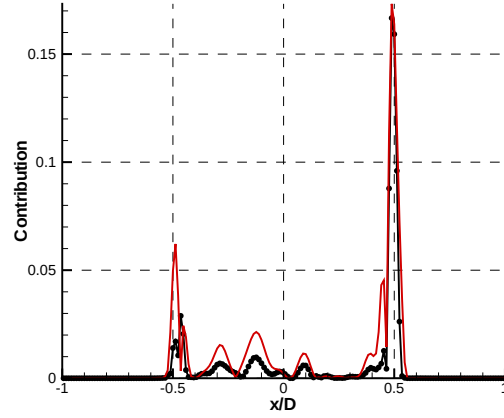
(a) C_3 : symboles, C_3^m : ligne continue.(b) C_1 : symboles, C_1^m : ligne continue.

FIGURE 3.27 – Profils selon x (ligne pointillée sur la figure 3.24(a)) des contributions réelles C_i (symboles) et modélisées, C_i^m (ligne pleine) du terme convectif, avec $i = \{1, 3\}$.
 (a) direction axiale : $C_3 = \partial \tau_{\rho u_3 u_j} / \partial x_j$ et (b) direction transverse $C_1 = \partial \tau_{\rho u_1 u_j} / \partial x_j$

défauts, une dispersion autour de cette droite apparait, plus ou moins prononcée selon la qualité de la modélisation. Sur la figure 3.28(b), le modèle présente, par exemple, une bonne corrélation avec une faible dispersion contrairement au cas de la figure 3.28(c) qui présente une dispersion beaucoup plus élevée et où il est difficile d'observer une corrélation claire. En outre, on peut observer sur ce dernier exemple qu'une même valeur de la contribution réelle peut conduire à des valeurs très différentes de la contribution modèle (notamment en terme de signe). Plus que la valeur de la constante Cst , c'est la linéarité et la dispersion de la modélisation face à la contribution exacte qui sont réellement significatives. En effet une valeur de $Cst \neq 1$ peut, selon les cas, simplement signifier un rapport de proportionnalité entre le modèle et le terme réel.

On comprend dès lors que pour discriminer les modélisations entre elles, il faut disposer d'un critère pour caractériser la dispersion des valeurs du modèle par rapport à la contribution exacte. Ainsi, dans une première approche, une mesure de la dispersion peut s'écrire, par exemple, de la manière suivante :

$$\varepsilon_{dis} = \sigma(\Lambda_i - \Lambda_i^m) . \quad (3.138)$$

où σ définit un opérateur statistique (*e.g.* moyenne arithmétique). ε_{dis} est alors un scalaire assimilable à une erreur, on cherche le modèle qui permettra de minimiser celle-ci.

En pratique, il faut donc comparer, sur les points constituant le maillage de calcul DNS, les valeurs de Λ_i et Λ_i^m . Néanmoins, vu le nombre de cellules de calcul du maillage très important dans chaque zone, on propose de réduire le nombre d'échantillons à un nombre n , suffisamment élevé tout de même pour mener des statistiques. On relève donc en n points, déterminés au hasard, Λ_i et Λ_i^m dans les zones testées. On obtient alors 2 vecteurs de données, $\vec{D}^e$ et $\vec{D}^m$, dont la composante k contient les valeurs de Λ_i

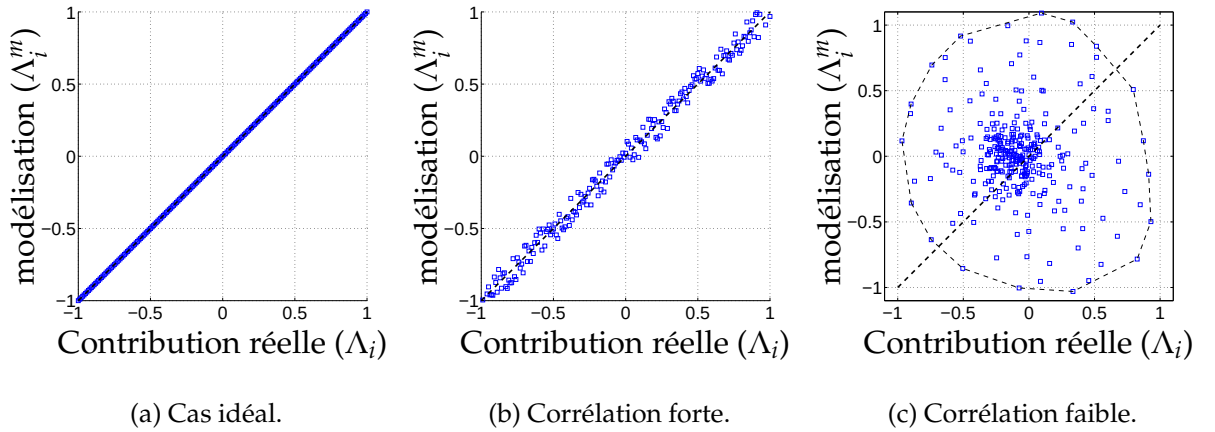


FIGURE 3.28 – Exemples de diagrammes de dispersion, en abscisse les valeurs de la contribution réelle et en ordonnée sa modélisation. En (a) le modèle représente exactement la contribution de sous maille. En (b) il existe une corrélation relativement forte avec une dispersion autour de la droite $y = x$ (droite pointillée), alors qu'en (c) la corrélation est inexistante.

et Λ_i^m respectivement, prélevées au même point de l'espace $\vec{X}$ et au même instant t .

Poids des modélisations et erreurs La relation 3.138 donne une erreur absolue mais ne renseigne pas sur la proportion relative de la modélisation par rapport au terme résolu. On peut cependant décomposer Λ_i en une partie résolue, Λ_{r_i} , et une partie de sous maille, Λ'_i , telle que :

$$\Lambda_i = \Lambda'_i - \Lambda_{r_i} \text{ avec } , \quad (3.139)$$

$$\Lambda'_i = \frac{\partial \tau'_{ij}}{\partial x_j} = \frac{\partial \overline{\alpha_i \beta_j}}{\partial x_j} , \quad (3.140)$$

$$\Lambda_{r_i} = \frac{\partial \tau_{rij}}{\partial x_j} = \frac{\partial \overline{\alpha_i} \overline{\beta_j}}{\partial x_j} . \quad (3.141)$$

Il est à noter que dans ces relations, Λ'_i , constitue, en réalité, la totalité du terme que l'on cherche à fermer dans les équations de transport. A l'instar de $\partial \rho \overline{u_i u_j} / \partial x_j$ dans l'équation 3.32 dans le cadre monophasique (c.f. 3.3.1). On s'en servira donc comme point d'appui afin d'obtenir des erreurs relatives dans la suite, étant donné qu'elle est calculable à partir des champs DNS.

La figure 3.29 présente la répartition théorique des poids moyen des différents termes de cette décomposition, $\sigma(\Lambda_i)$, $\sigma(\Lambda'_i)$ et $\sigma(\Lambda_{r_i})$. On s'attend à ce que la fluctuation, $\sigma(\Lambda'_i)$, et la partie résolue, $\sigma(\Lambda_{r_i})$, soient d'autant plus proche que contribution de sous maille, $\sigma(\Lambda_i)$, est faible. Enfin, plus la modélisation Λ_i^m est fidèle à la contribution de sous maille, plus l'erreur moyenne, ε_{dis} , doit être faible.

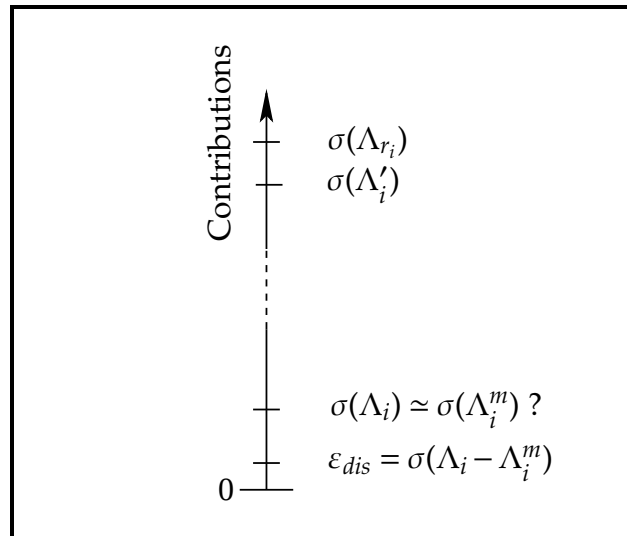


FIGURE 3.29 – « Poids » théorique des différentes composantes de la contribution de sous maille Λ_i , ainsi que sa modélisation Λ_i^m . Dans le cas idéal l'erreur, ε_{dis} devrait être nulle.

En pratique, les valeurs de ces poids vont dépendre de la zone et de la modélisation testées ainsi que de la direction de la contribution que l'on observe. À titre d'exemple, la figure 3.30 présente un profil selon x des contributions exactes du terme convectif, C_i , dans la direction transverse au sein de la zone 3. On peut y voir que la fluctuation C'_1 , représentée en symbole noir, est effectivement proche du terme résolu, C_{r_1} (ligne continue rouge). Néanmoins, il est également possible de voir que dans cette zone, la proportion de la contribution de sous maille, C_1 , ligne tirets-points, est loin d'être négligeable. Ce qui est confirmé par les valeurs de $\sigma(C'_1)$, $\sigma(C_{r_1})$ et $\sigma(C_1)$, (dans ce cas, les moyennes quadratiques), dont les niveaux sont représentés sur les droites, en symboles cercles, carrés et tirets, respectivement⁵. En moyenne, sur cet exemple la contribution de sous maille vaut environ 30% de la contribution fermée, C'_1 . La hiérarchie de la figure 3.29 est respectée. Néanmoins il est à noter que la contribution de sous maille est importante dans ce cas précis.

Afin d'estimer l'erreur relative des différentes modélisations, il convient de se définir l'opérateur σ . Il y a beaucoup de manières de caractériser la dispersion statistique du modèle. Par exemple, il est possible de prendre, en première instance, la moyenne arithmétique sur l'ensemble des échantillons de mesure. Mais l'évaluation de l'erreur ε_{dis} par cette dernière peut facilement tendre vers 0. Et nous ne voyons pas de raison pour laquelle une erreur en un point de l'espace pourrait être compensée par une erreur du signe opposé en autre un point distinct de l'espace.

On lui préférera, alors, la moyenne quadratique (déjà utilisée pour l'exemple de la figure 3.30), qui va en quelque sorte « accumuler » les erreurs commises par la modélisation sur l'ensemble des données du diagramme de dispersion. Cette moyenne est donnée par la relation suivante :

5. Sur cet exemple, les moyennes sont obtenues uniquement avec les valeurs relevées sur le profil et non sur toute la zone teste.

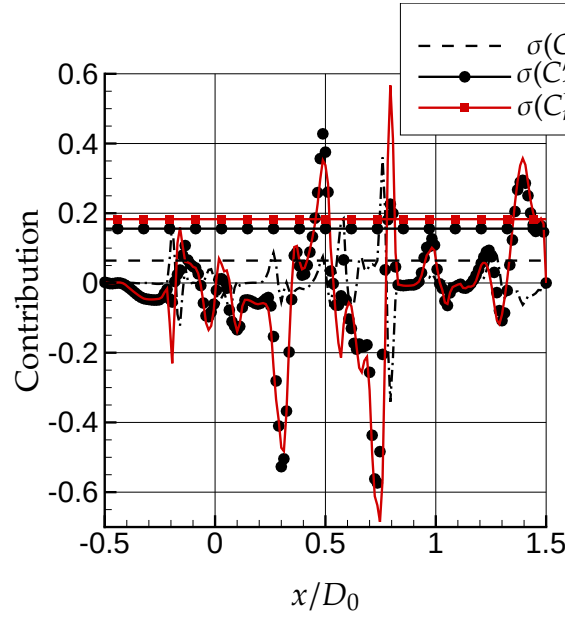


FIGURE 3.30 – Profils des contributions exactes du terme convectif C_i dans la direction 1. Symbole : C'_1 ; continue rouge : C_{r_1} ; tiret-points : C_1 . Les niveaux de $\sigma(C'_1)$, $\sigma(C_{r_1})$ et $\sigma(C_i)$ sont également tracés (voir légende).

$$\sigma(A) = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (D_k^A)^2} , \quad (3.142)$$

avec A une variable quelconque et $\vec{D}^A$ le vecteur de donnée de A et n le nombre d'échantillons. On définit alors les erreurs suivantes pour chaque direction⁶ i :

$$\varepsilon_{sgs} = \sigma(\Lambda_i) / \sigma(\Lambda'_i) , \quad (3.143)$$

$$\varepsilon_{err} = \sigma(\Lambda_i - \Lambda_i^m) / \sigma(\Lambda'_i) , \quad (3.144)$$

$$\varepsilon_{rap} = \varepsilon_{err} / \varepsilon_{sgs} = \sigma(\Lambda_i - \Lambda_i^m) / \sigma(\Lambda_i) . \quad (3.145)$$

- ε_{sgs} , n'est pas à proprement parler une erreur, mais plutôt un indicateur de la proportion du terme de sous maille à fermer Λ_i par rapport à la contribution de sous maille totale Λ'_i . On s'attend à ce que cette proportion augmente avec la taille du filtre, $\bar{\Delta}$.
- ε_{err} représente la proportion de l'erreur commise par le modèle par rapport à la contribution totale, dans l'idéal cette valeur doit donc tendre vers 0. Cette erreur est la plupart du temps assez faible car la contribution totale, Λ'_i est souvent grande devant le terme que l'on cherche à modéliser.
- On définit alors ε_{rap} qui donne le ratio des 2 erreurs précédentes et représente la proportion de l'erreur commise par le modèle par rapport à la contribution exacte à modéliser, Λ_i . Une valeur inférieure à 100% indiquera alors qu'en moyenne,

6. Ici, les relations ne sont pas sommées sur i

Terme SGS	Contribution à modéliser (Λ_i)	Partie fermée (Λ'_i)	Partie résolue
$\tau_{\rho u_i u_j}$	$C_i = \partial(\overline{\rho u_i u_j} - \bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j) / \partial x_j$	$C'_i = \partial \overline{\rho u_i u_j} / \partial x_j$	$C_{r_i} = \partial \bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j / \partial x_j$
$\tau_{\rho u_i}$	$T_i = \partial(\overline{\rho u_i} - \bar{\rho} \bar{u}_i) / \partial t$	$T'_i = \partial \overline{\rho u_i} / \partial t$	$T_{r_i} = \partial \bar{\rho} \bar{u}_i / \partial t$
τ_χ	$\Pi = \overline{u_i \partial \chi / \partial x_i} - \bar{u}_i \bar{\partial \chi / \partial x_i}$	$\Pi' = \overline{u_i \partial \chi / \partial x_i}$	$\Pi_r = \bar{u}_i \bar{\partial \chi / \partial x_i}$

TABLE 3.3 – Expressions des différents termes de la décomposition 3.139 pour les termes convectif, temporel et interfacial.

sur les échantillons testés, le modèle se comporte bien et n'induit pas d'erreurs supplémentaires. Dans le cas contraire, supérieur à 100%, le modèle surestime globalement la contribution de sous maille. Finalement, une valeur proche de 100% indique que le modèle n'a, en moyenne, que peu d'effet.

On va donc chercher dans la suite à tester le modèle de Smagorinsky et de similarité d'échelles pour le terme convectif, $\tau_{\rho u_i u_j}$, et le terme temporel, $\tau_{\rho u_i}$ présents dans l'équation de quantité de mouvement. Ainsi que pour le terme τ_χ présent dans l'équation de la fonction de phase. On va ainsi présenter, pour chaque terme, un tableau résumant pour chaque direction, transverse et axiale, les erreurs définies plus haut, à savoir ε_{sgs} , ε_{err} et ε_{rap} . Ces erreurs ont pour but de simplifier l'interprétation que nous pouvons faire des nombreux diagrammes de dispersion et pouvoir clairement observer des tendances. Cependant on accompagnera systématiquement ces tableaux avec les graphiques correspondants. Sur ces diagrammes de dispersion, on tracera également une régression linéaire de la modélisation en fonction de la contribution exacte afin d'aider à la lecture de ces graphiques.

A des fins de clarté le tableau 3.3 rappelle, pour chaque terme de sous maille, les expressions des contributions à modéliser (correspondant à Λ_i défini plus haut) et les contributions fermées (correspondant à Λ'_i).

3.5.4.4 Comparaison des contributions modèles et exactes pour le terme convectif

Ici on cherche donc à savoir dans quelle mesure les 2 fermetures proposées de la contribution de sous maille du terme convectif, C_i , sont valides.

Modèle de Smagorinsky Les tableaux 3.4 et 3.5 résument les résultats obtenus dans le cas du modèle de Smagorinsky dans la direction transverse et axiale respectivement. Ces tableaux présentent les résultats dans les zones 1 et 3, avec des tailles de filtre $\bar{\Delta}_5$ et $\bar{\Delta}_{13}$. Enfin, pour chaque cas, les tableaux montrent les résultats pour un coefficient C_s constant, puis déterminé grâce à la procédure dynamique.

Les diagrammes de dispersion correspondants aux tableaux 3.4 et 3.5 sont tracés sur les figures 3.31 et 3.32 pour la modélisation de Smagorinsky avec un coefficient C_s constant et 3.33 et 3.34 pour la procédure dynamique. Sur toutes ces figures, (a) et (c) correspondent à la direction transverse dans les zones 1 et 3 respectivement. Et, (b) et (d) à la direction longitudinale dans les zones 1 et 3 également.

On s'intéresse, tout d'abord, à la direction transverse (tableaux 3.4), il est alors possible de faire les remarques suivantes :

- a) On remarque que plus la taille du filtre, $\bar{\Delta}$, augmente plus la proportion du terme de sous maille augmente par rapport à la fluctuation, C'_1 . Et ce, aussi bien dans la direction transverse que dans la direction axiale. Par exemple, dans cette dernière direction en zone 3, ε_{sgs} passe d'environ 10% avec $\bar{\Delta}_5$ à plus de 20% avec $\bar{\Delta}_{13}$. Cette remarque est également valable quelle que soit la zone d'étude. D'une manière générale, c'est un résultat attendu. En effet, plus la taille du filtre est grand plus il y a d'échelles non résolues.
- b) Cette proportion est plus faible dans la zone 1 que dans la zone 3. Avec $\bar{\Delta}_5$, par exemple, la proportion passe d'environ 10% en zone 1 à environ 35% en zone 3. ε_{sgs} dans cette dernière zone est élevée mais rejoint les résultats montrés sur la figure 3.30.
- c) L'étude des 2 erreurs ε_{err} et ε_{rap} montre qu'en moyenne le modèle de Smagorinsky surestime la contribution de sous maille.
- d) Néanmoins, le modèle semble faire moins d'erreurs en zone 3 qu'en zone 1 (Globalement, $\varepsilon_{rap} > 100\%$ en zone 1 et $\varepsilon_{rap} \leq 100\%$ en zone 3). Ce qui peut s'expliquer par l'homogénéisation du champ de vitesse en zone 3 d'une part, et d'autre part, par la présence d'une zone inertielle dans le spectre de l'énergie cinétique turbulente en zone 3, ce que nous n'avons pas relevé dans la zone 1 (c.f. figure 3.16). Alors que la modélisation de Smagorinsky sous entend implicitement la présence de cette coupure.
- e) Finalement la procédure dynamique semble également diminuer l'erreur moyenne commise, mise à part une erreur très importante que l'on peut relever en zone 1 pour une taille de filtre $\bar{\Delta}_{13}$ ($\varepsilon_{rap} \approx 190\%$ avec C_s constant et $> 250\%$ pour la procédure dynamique). Il est à noter que, pour ce dernier cas, le filtre test est tel que $\hat{\Delta} = 2\bar{\Delta}_{13}$, ce qui est en dehors de la zone de validité relevée pour cette zone expliquant sûrement en partie ce résultat médiocre.

Les résultats sont sensiblement identiques dans la direction axiale (tableau 3.5), sauf pour le point **b**). En effet, ε_{sgs} indique que dans cette direction la contribution de sous maille semble être plus importante dans la zone 1 que dans la zone 3 ce qui est exactement l'inverse que dans la direction transverse. Nous n'arrivons pas à clairement expliquer ce fait. Étant donné que l'on observe la divergence du tenseur de sous maille dans la direction i , $C_i = \partial \tau_{\rho u_i u_j} / \partial x_j$, il se pourrait que cela soit dû à l'« isotropisation » des vitesses en zone 3 par rapport à la zone 1. Mais des investigations plus profondes seraient nécessaires pour éclaircir ce point.

L'observation des diagrammes de dispersion (figures 3.31, 3.32, 3.33 et 3.34) montre qu'il est effectivement difficile, qualitativement, d'observer une corrélation claire entre la contribution exacte et celle de sous maille, aussi bien dans la direction transverse que longitudinale. Dans tous les cas, la modélisation est fortement dispersée, et ce d'autant plus que la taille du filtre augmente. On peut tout de même noter que pour la

	Procédure	$\bar{\Delta}/\Delta_x$	$\varepsilon_{sgs}(\%)$	$\varepsilon_{err}(\%)$	$\varepsilon_{rap}(\%)$
zone 1	C_s constant	5	12.7	18.4	144.9
zone 1	C_s constant	13	19.0	36.3	191.0
zone 3	C_s constant	5	43.5	42.2	97.0
zone 3	C_s constant	13	66.2	67.6	102.1
zone 1	C_s dynamique	5	14.7	22.0	150.1
zone 1	C_s dynamique	13	20.4	53.4	262.6
zone 3	C_s dynamique	5	35.2	30.4	86.5
zone 3	C_s dynamique	13	66.9	64.9	97.0

TABLE 3.4 – Résultats pour le terme convectif, C_1^m , modèle de Smagorinsky, direction transverse.

direction axiale dans la zone 3, il semble que la modélisation soit meilleure, notamment pour une taille de filtre $\bar{\Delta}_5$. Ceci est visible sur la figure 3.31(d) pour le cas avec C_s constant et figure 3.33(d) pour la procédure dynamique. Néanmoins, les erreurs restent importantes (c.f. tableau 3.5). Au final, il est également intéressant de relever que les ordres de grandeur obtenus avec les modélisations sont globalement les mêmes que ceux des contributions exactes.

Sur la figure 3.35 la valeur moyenne du coefficient de Smagorinsky, calculé avec la procédure dynamique, est tracée dans la direction axiale du jet (z). On peut constater, en premier lieu, que l'ordre de grandeur relevé est d'environ $|C_s| \simeq 0.01$, ce qui correspond à la valeur théorique. On peut également relever que sur les 4 premiers diamètres de jets, le coefficient C_s a une valeur négative avant de rejoindre une valeur positive d'environ 0.01 pour des positions plus éloignées. Cela peut indiquer la présence d'un phénomène de « backscatter » en proche injecteur, qui pourrait être provoqué par des structures cohérentes à la sortie de celui-ci. En effet, la simulation DNS utilise une condition limite d'injection, développée par Klein *et al* [56], qui permet d'imposer un champ de vitesse dont les fluctuations sont corrélées, au sens de la turbulence, en temps et en espace (ce point sera d'ailleurs détaillé dans le chapitre 4). Les tourbillons imposés en conditions limites d'injection pourraient alors être à l'origine de ce comportement particulier du coefficient C_s qui n'est donc pas représentatif.

Modèle de similarité d'échelles Dans ce paragraphe, on présente les résultats pour le modèle de similarité d'échelles. Sur les tableaux 3.6 et 3.7 sont résumées les erreurs trouvées dans les directions transverses et axiales respectivement, en zone 1 et 3 pour les 2 tailles de filtre choisies, $\bar{\Delta}_5$ et $\bar{\Delta}_{13}$. L'étude de ces tableaux montre que pour les 2 directions et quelle que soit la taille du filtre, cette modélisation est systématiquement meilleure que le modèle de Smagorinsky. En effet, parmi les erreurs que nous avons définies, ε_{err} est beaucoup plus faible que pour le modèle de Smagorinsky, ceci est visible, par exemple, en comparant les tableaux 3.5 et 3.7 pour la direction axiale. En conséquence, ε_{rap} est également plus faible. Mais surtout il est important de noter qu'il est systématiquement sous les 100%. Cette dernière remarque signifie donc que globa-

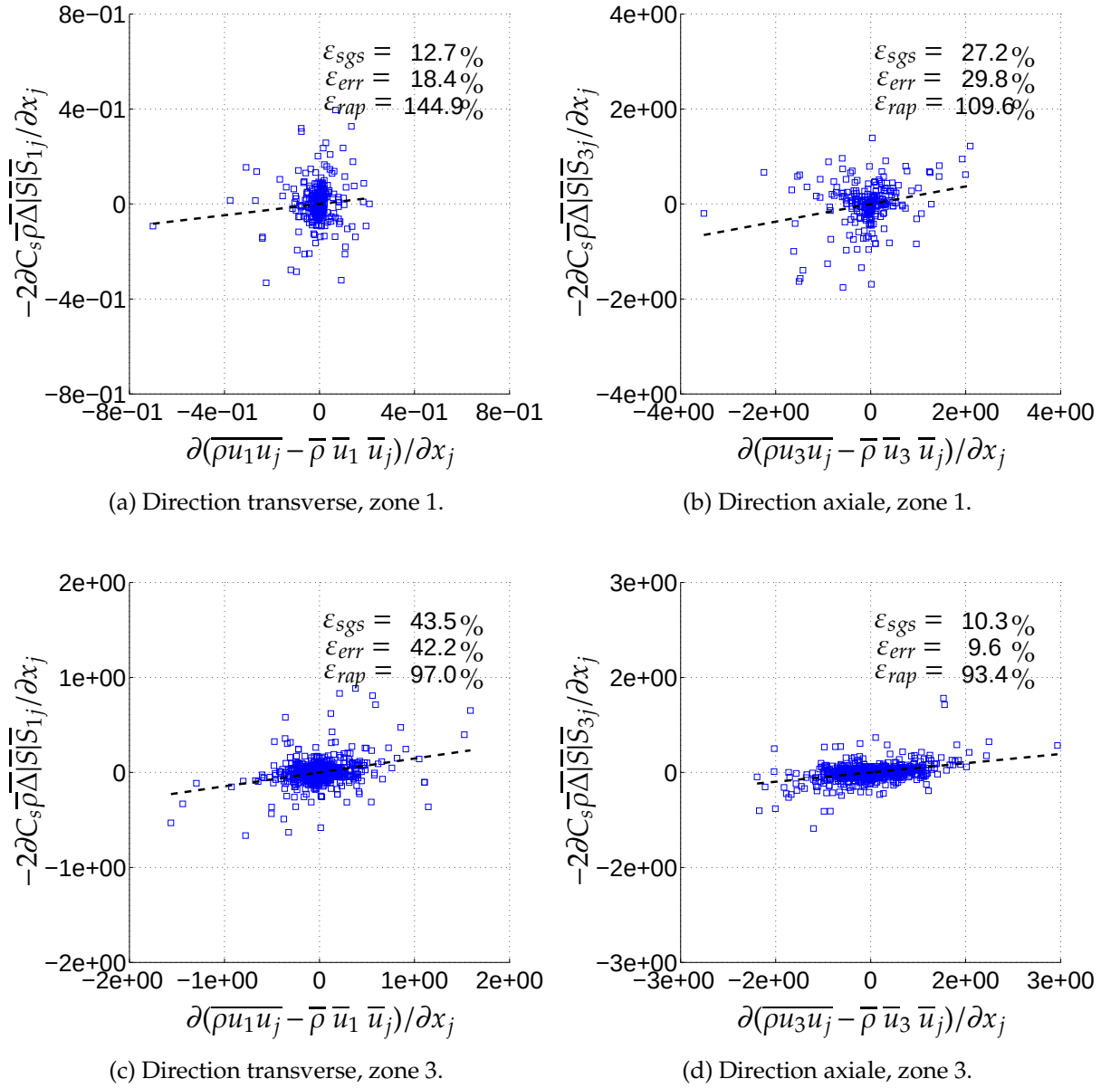


FIGURE 3.31 – Résultats pour le modèle de Smagorinsky pour le terme convectif, pour un coefficient C_s constant, $\bar{\Delta} = 5\Delta_x$.

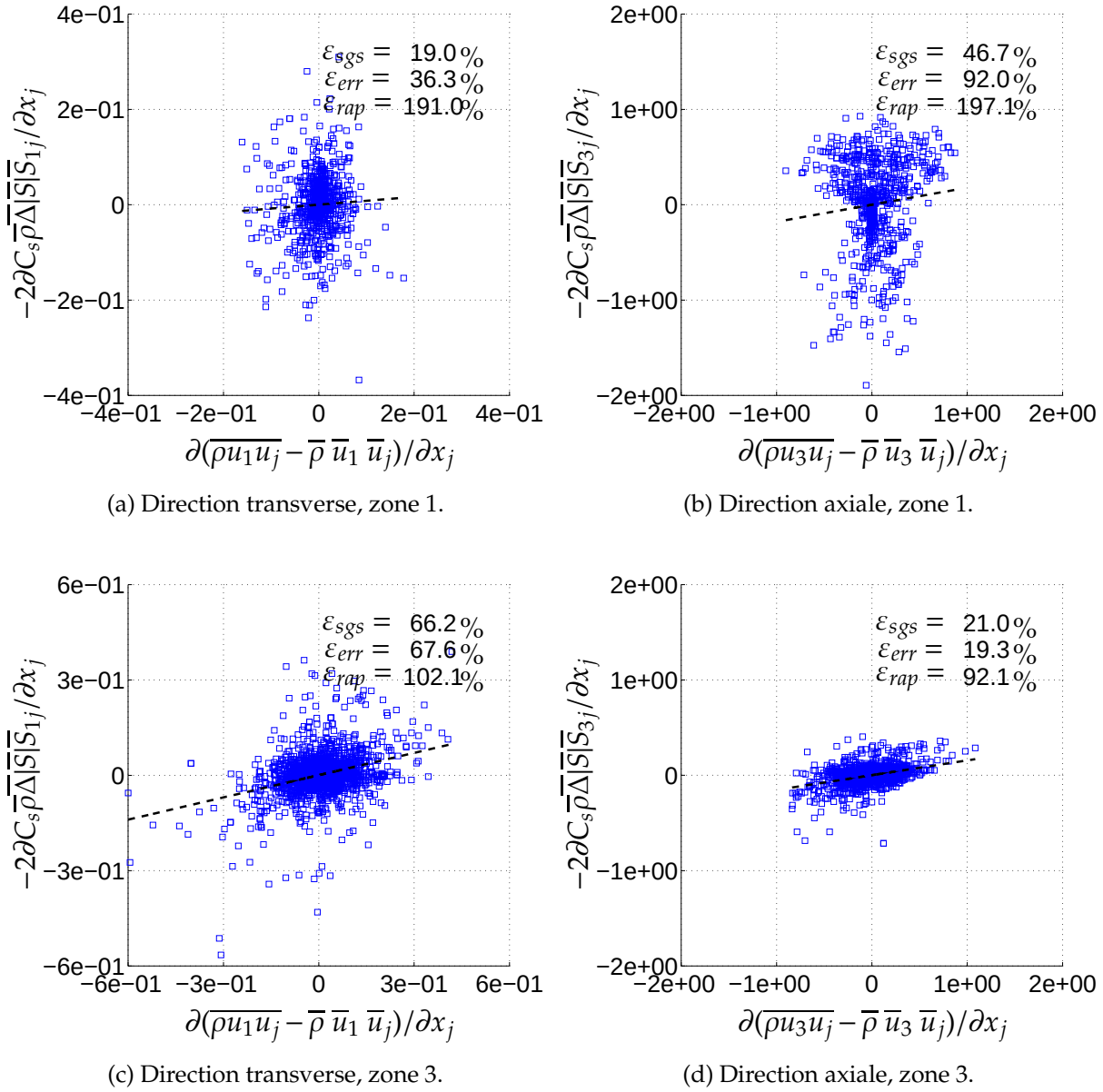


FIGURE 3.32 – Résultats pour le modèle de Smagorinsky pour le terme convectif, pour un coefficient C_s constant, $\bar{\Delta} = 13\Delta_x$.

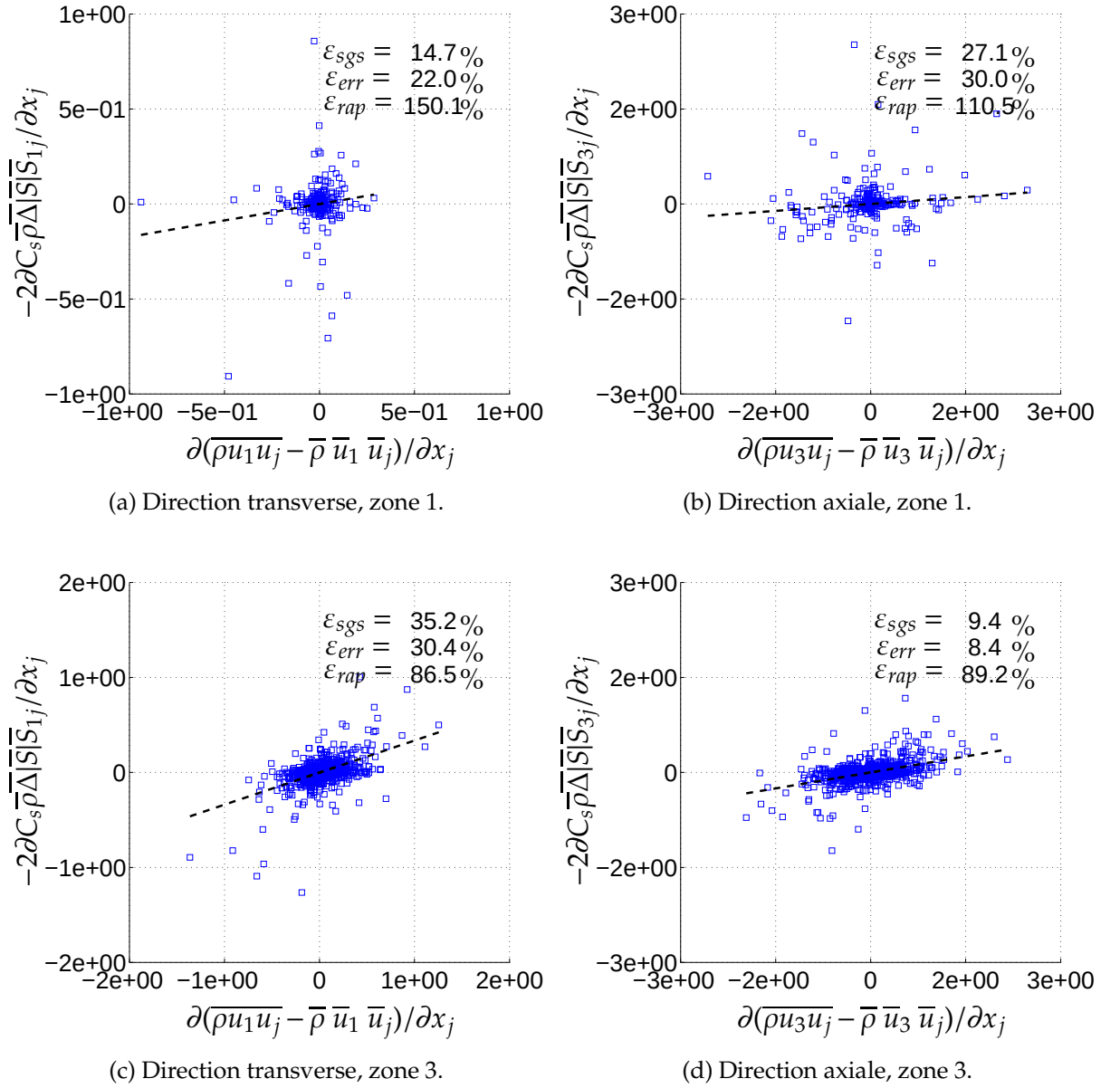


FIGURE 3.33 – Résultats pour le modèle de Smagorinsky pour le terme convectif, procédure dynamique, $\bar{\Delta} = 5\Delta_x$.

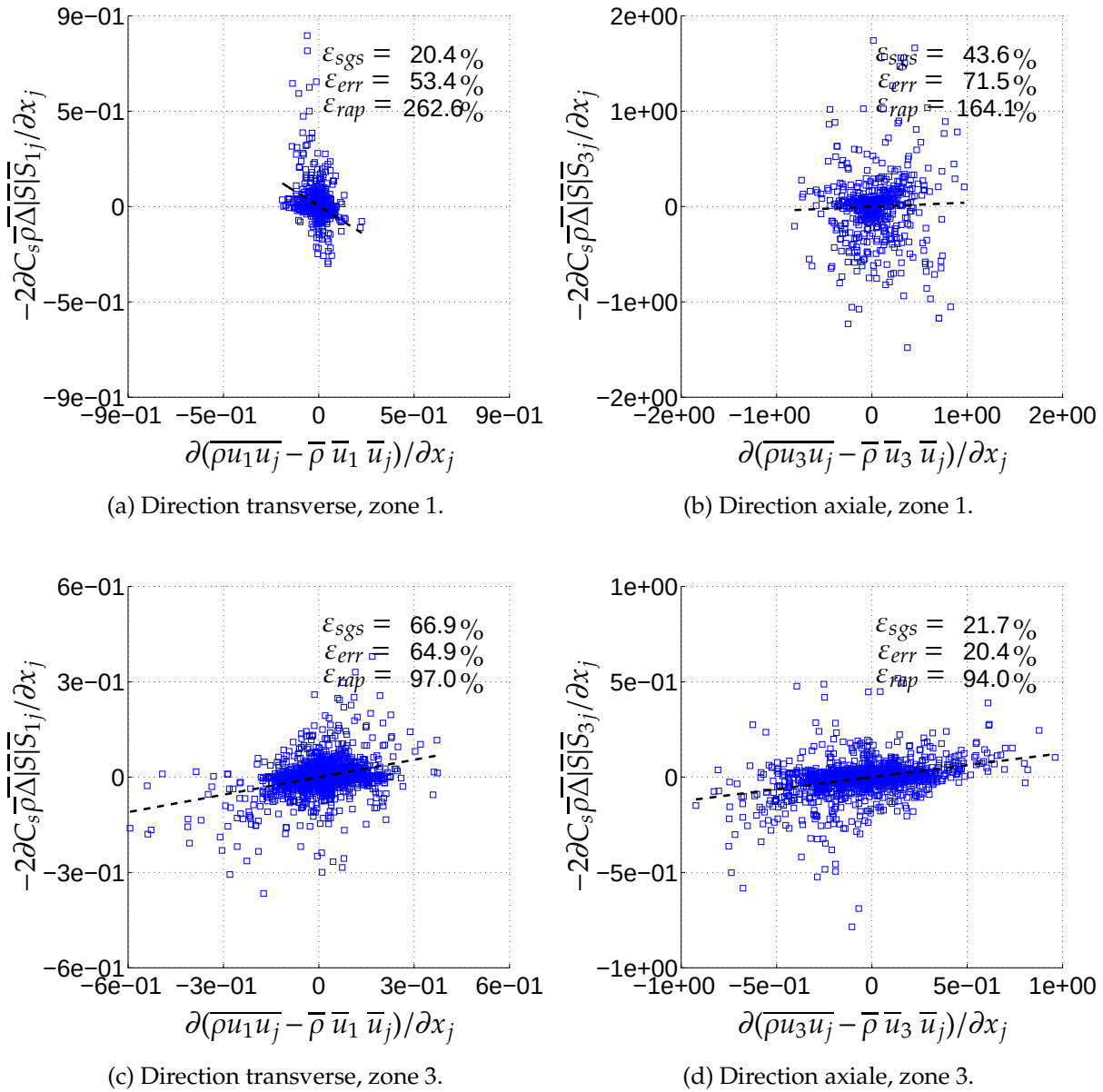


FIGURE 3.34 – Résultats pour le modèle de Smagorinsky pour le terme convectif, procédure dynamique, $\bar{\Delta} = 13\Delta_x$.

	Procédure	$\bar{\Delta}/\Delta_x$	$\varepsilon_{sgs}(\%)$	$\varepsilon_{err}(\%)$	$\varepsilon_{rap}(\%)$
zone 1	C_s constant	5	27.2	29.8	109.6
zone 1	C_s constant	13	46.7	92.0	197.1
zone 3	C_s constant	5	10.3	9.6	93.4
zone 3	C_s constant	13	21.0	19.3	92.1
zone 1	C_s dynamique	5	27.1	30.0	110.5
zone 1	C_s dynamique	13	43.6	71.5	164.1
zone 3	C_s dynamique	5	9.4	8.4	89.2
zone 3	C_s dynamique	13	21.7	20.4	94.0

TABLE 3.5 – Résultats pour le terme convectif, C_3^m , modèle de Smagorinsky, direction axiale.

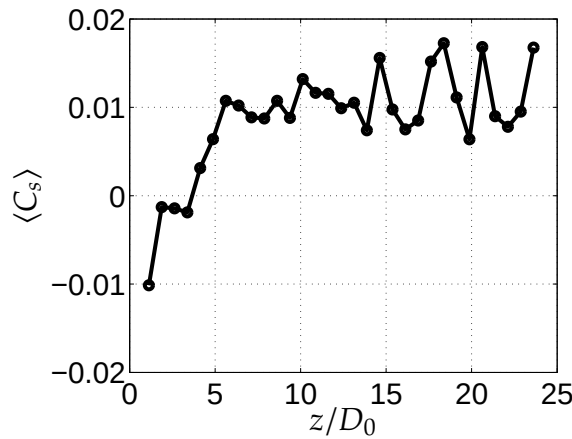
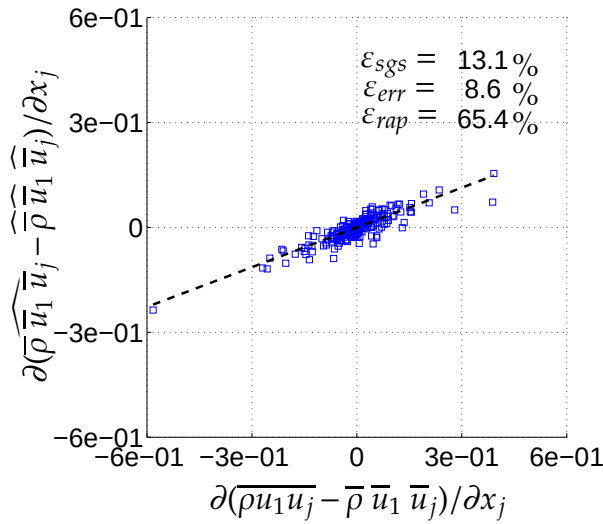


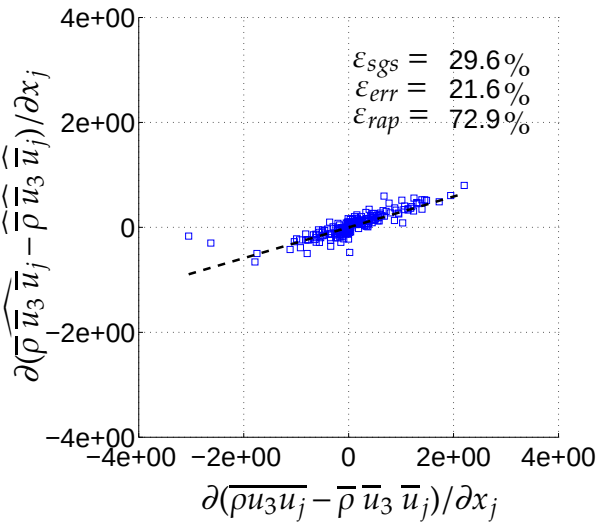
FIGURE 3.35 – Evolution du coefficient C_s dynamique dans la direction de l'axe du jet.

lement la contribution du modèle n'implique pas plus d'erreur que sans modélisation. Néanmoins, cette erreur, telle que nous l'avons définie, reste importante. C'est-à-dire supérieure à 60% dans tous les cas. On peut également remarquer qu'à l'instar du modèle de Smagorinsky, le modèle de similarité d'échelles comporte moins d'erreur avec une taille de filtre plus petite.

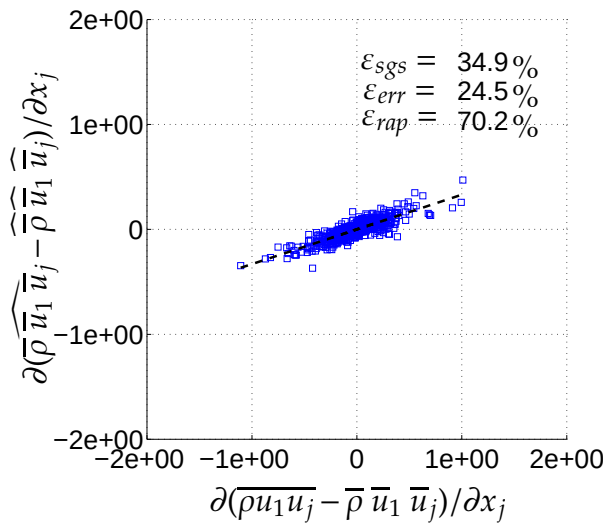
Les diagrammes de dispersion correspondants à ce modèle sont présentés sur les figures 3.36 pour une taille de filtre $\bar{\Delta}_5$ et 3.37 pour $\bar{\Delta}_{13}$. Qualitativement, il est beaucoup plus aisé d'observer une corrélation entre la contribution exacte et modélisée que dans le cas du modèle de Smagorinsky. Et ce, aussi bien dans la direction transverse que axiale. Ainsi, la pente de la régression linéaire peut permettre de retrouver le coefficient C_c du modèle (relation 3.132). La figure 3.38 présente alors l'évolution du coefficient, C_s , en fonction de la taille du filtre utilisé, $\bar{\Delta}$ au sein de la zone 1 en (a) et en zone 3 en (b). On remarque que pour les valeurs de taille de filtre qui nous intéressent, la relation entre C_c et $\bar{\Delta}$ est quasi linéaire. Alors que les 2 directions transverses sont similaires, la direction axiale, qui constitue une direction particulière dans cet écoulement, se détache quelque peu, notamment en zone 1.



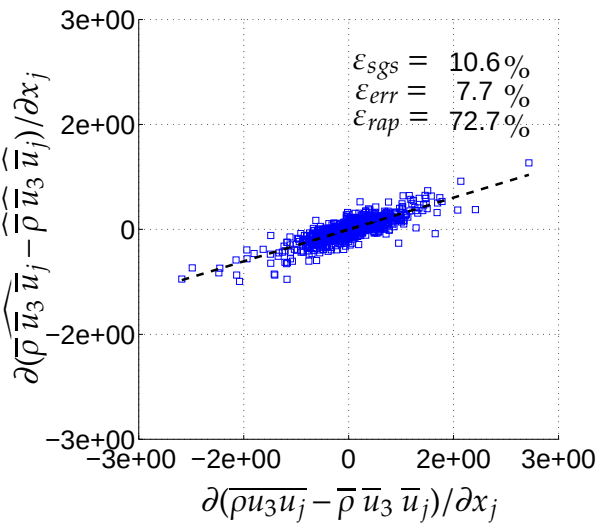
(a) Direction transverse, zone 1.



(b) Direction axiale, zone 1.



(c) Direction transverse, zone 3.



(d) Direction axiale, zone 3.

FIGURE 3.36 – Résultats pour le modèle de similarité d'échelles pour le terme convectif, $\bar{\Delta} = 5\Delta_x$.

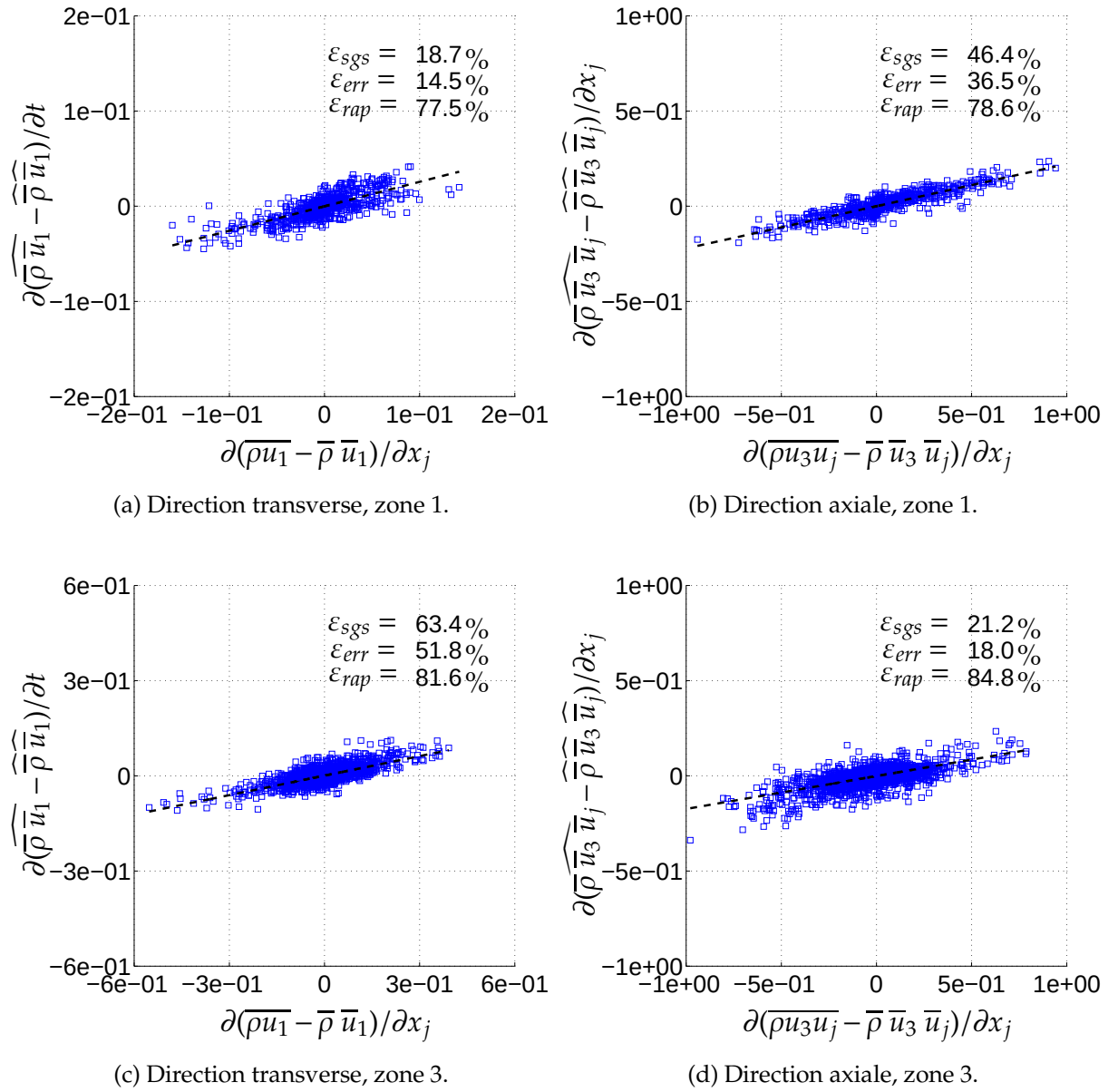


FIGURE 3.37 – Résultats pour le modèle de similarité d'échelles pour le terme convectif, $\bar{\Delta} = 13\Delta_x$.

	$\overline{\Delta}/\Delta_x$	$\varepsilon_{sgs}(\%)$	$\varepsilon_{err}(\%)$	$\varepsilon_{rap}(\%)$
zone 1	5	13.1	8.6	65.4
zone 1	13	18.7	14.5	77.5
zone 3	5	34.9	24.5	70.2
zone 3	13	63.4	51.8	81.6

TABLE 3.6 – Résultats pour le terme convectif, C_1^m , modèle de similarité d'échelles, direction transverse.

	$\overline{\Delta}/\Delta_x$	$\varepsilon_{sgs}(\%)$	$\varepsilon_{err}(\%)$	$\varepsilon_{rap}(\%)$
zone 1	5	29.6	21.6	72.9
zone 1	13	46.4	36.5	78.6
zone 3	5	10.6	7.7	72.7
zone 3	13	21.2	18.0	84.8

TABLE 3.7 – Résultats pour le terme convectif, C_3^m , modèle de similarité d'échelles, direction axiale.

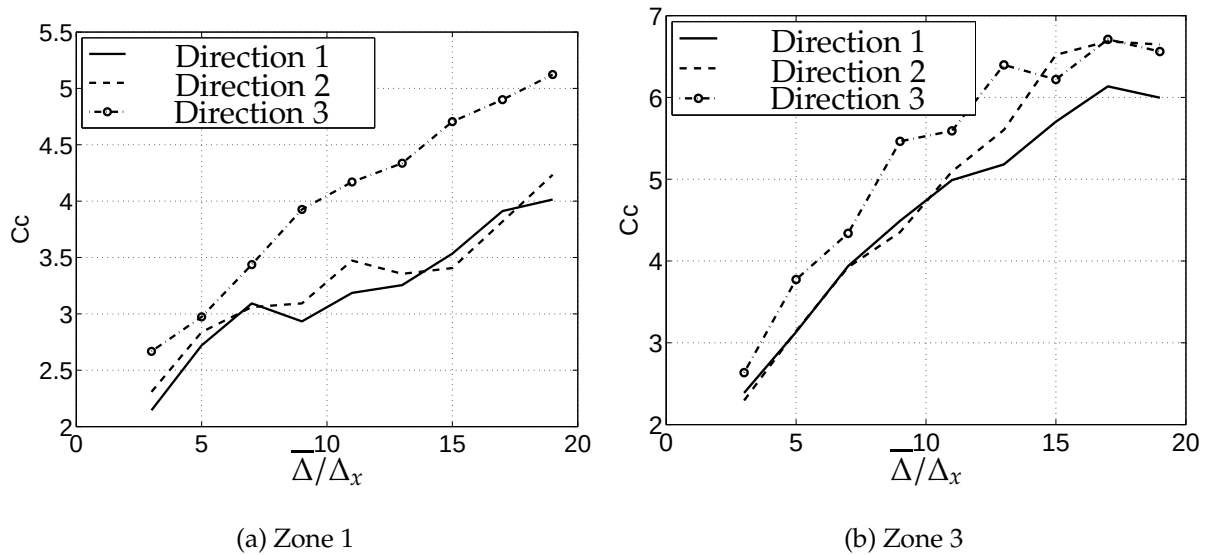


FIGURE 3.38 – Évolution du coefficient C_c en fonction du rapport $\overline{\Delta}/\Delta_x$ dans les 3 directions de l'espace. Pour les 2 zones d'études : proche injecteur, zone 1 en (a), et atomisée, zone 3 en (c).

	$\bar{\Delta}/\Delta_x$	$\varepsilon_{sgs}(\%)$	$\varepsilon_{err}(\%)$	$\varepsilon_{rap}(\%)$
zone 1	5	13.0	9.3	71.5
zone 1	13	15.9	13.0	81.7
zone 3	5	38.8	27.1	70.0
zone 3	13	62.7	51.9	82.7

TABLE 3.8 – Résultats pour le terme temporel, T_1^m , modèle de similarité d'échelles, direction transverse.

	$\bar{\Delta}/\Delta_x$	$\varepsilon_{sgs}(\%)$	$\varepsilon_{err}(\%)$	$\varepsilon_{rap}(\%)$
zone 1	5	16.9	11.5	67.9
zone 1	13	30.3	24.2	80.0
zone 3	5	5.9	4.3	72.3
zone 3	13	12.4	10.1	81.7

TABLE 3.9 – Résultats pour le terme temporel, T_3^m , modèle de similarité d'échelles, direction axiale.

3.5.4.5 Comparaison des contributions modèles et exactes pour le terme temporel

Les résultats de la modélisation du terme temporel, T_i , de l'équation de transport de la quantité de mouvement sont détaillés dans cette section. On ne présente que les résultats et les diagrammes de dispersion pour le modèle de similarité des échelles, le modèle de Smagorinsky menant sensiblement aux mêmes conclusions que pour le terme convectif. Sur les tableaux 3.8 et 3.9 sont résumées les différentes erreurs relevées sur les diagrammes de dispersion, dans la direction transverse puis axiale respectivement.

En observant, ε_{sgs} , qui donne la proportion de la contribution T_i que l'on doit modéliser par rapport au terme de fluctuation, T'_i , il est possible de remarquer que ce terme se comporte en tout point comme le terme convectif. En effet, à l'instar du terme convectif, la proportion de la modélisation est d'autant plus élevée que la taille du filtre est grande, ce qui rejoint la remarque **a)** de la section 3.5.4.4.

On peut également observer que, comme pour le terme convectif, la proportion de la contribution de sous maille à modéliser est plus importante en zone 3 qu'en zone 1, pour la direction transverse (*e.g.* $\varepsilon_{sgs} = 13\%$ et 38.8% respectivement avec $\bar{\Delta}_5$). Et que c'est exactement l'inverse pour la direction axiale, zone 1 : $\varepsilon_{sgs} = 16.9\%$, zone 3 : $\varepsilon_{sgs} = 5.9\%$, avec la taille de filtre $\bar{\Delta}_5$.

La modélisation de la contribution du terme de sous maille avec le modèle de similarité d'échelles donne une erreur, ε_{rap} inférieure à 100% dans tous les cas. Ainsi, pour les 2 directions testées, l'erreur est d'environ 70% pour une taille de filtre $\bar{\Delta}_5$ et 80% pour $\bar{\Delta}_{13}$. Ces erreurs sont donc du même ordre que celles obtenues pour la modélisation du terme convectif (tableaux 3.6 et 3.7).

Sur les diagrammes de dispersion, 3.39 pour $\bar{\Delta}_5$ et 3.40 pour $\bar{\Delta}_{13}$, il est possible

d'observer, qualitativement, une bonne corrélation entre la contribution de sous maille modélisée et le terme exact.

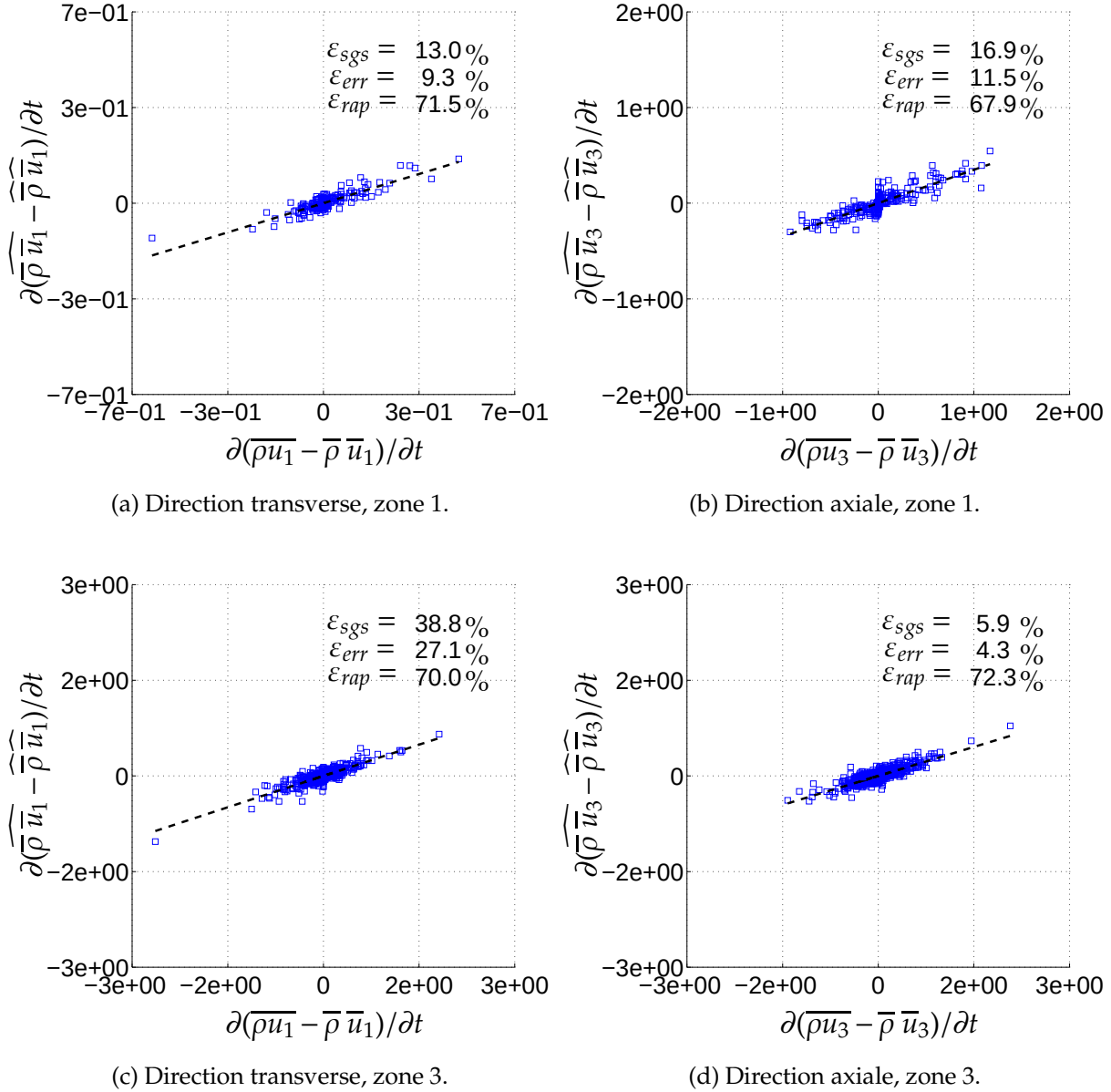


FIGURE 3.39 – Résultats pour le modèle de similarité d'échelles pour le terme temporel, $\bar{\Delta} = 5\Delta_x$.

3.5.4.6 Comparaison des contributions modèles et exactes pour le terme interfacial

Le dernier test *a priori* concerne la modélisation de la contribution du terme interfacial, Π . De nouveau on présente uniquement les résultats du modèle de similarité d'échelles, le modèle de Smagorinsky menant aux mêmes conclusions que pour les précédents termes testés. Sur le tableau 3.10 les erreurs relevées sur les diagrammes de

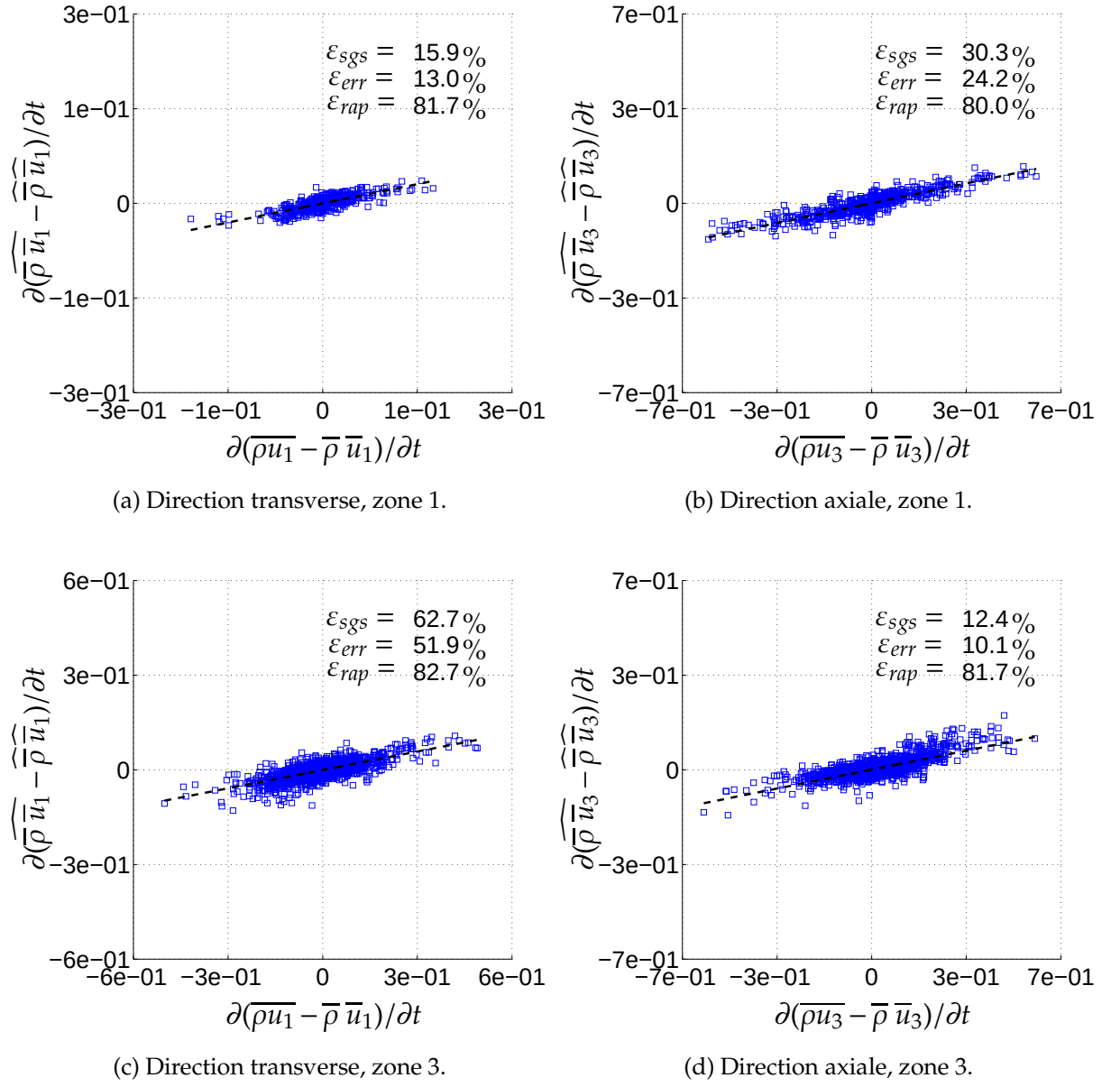


FIGURE 3.40 – Résultats pour le modèle de similarité d'échelles pour le terme temporel, $\bar{\Delta} = 13\Delta_x$.

	$\bar{\Delta}/\Delta_x$	$\varepsilon_{sgs}(\%)$	$\varepsilon_{err}(\%)$	$\varepsilon_{rap}(\%)$
zone 1	5	13.2	9.6	72.7
zone 1	13	33.8	28.5	84.6
zone 3	5	6.8	5.2	76.5
zone 3	13	14.8	13.2	88.8

TABLE 3.10 – Résultats du modèle de similarité d'échelles pour le terme interfacial Π^m

dispersion sont résumées. Ces derniers sont visibles sur la figure 3.41, en (a) et (b) avec $\bar{\Delta}_5$ et $\bar{\Delta}_{13}$ respectivement, pour la zone 1. Et (c) et (d) avec $\bar{\Delta} = 5$ et $13\Delta_x$ respectivement, pour la zone 3. Pour ce terme, et de la même manière que pour les 2 autres termes testés, la proportion de la contribution de sous maille est plus importante lorsque la taille du filtre est plus grande. Par contre cette proportion est plus forte en zone 1 qu'en zone 3. La modélisation présente des erreurs, ε_{err} et ε_{rap} inférieures à 100%.

Une fois de plus l'étude des diagrammes de dispersion (figure 3.41) montre que l'on peut clairement identifier, pour ce modèle, une corrélation entre la contribution modèle, Π^m et la contribution exacte Π , dans les 2 zones étudiées et pour les 2 tailles de filtre.

3.5.4.7 Conclusions et discussion sur les tests des modèles de sous maille

Les tests *a priori* conduits dans cette section appellent plusieurs conclusions et remarques. Ainsi 2 modèles, à savoir celui de Smagorinsky et celui de similarité d'échelles, ont été testés pour les 3 contributions de sous maille : convective, temporelle et interfaciale. Et ce, de façon systématique pour 2 tailles de filtre et pour 2 zones d'études bien distinctes.

En se basant sur les critères d'erreur que nous nous sommes fixé, il est possible de conclure que, dans tous les cas, le modèle de similarité d'échelles semble plus à même de reproduire les contributions de sous maille que le modèle de Smagorinsky, y compris lorsque la procédure dynamique est utilisée pour ce dernier. Ce qui est d'ailleurs confirmé par l'étude des différents diagrammes de dispersion. En outre, il est visible sur ceux-ci que l'on peut plus aisément détecter une corrélation entre les contributions exactes et les contributions modélisées pour le modèle de similarité d'échelles que pour celui de Smagorinsky. Les moyennes radiales pour les termes temporel et convectif montrent que le modèle de similarité d'échelles reproduit bien les contributions exactes, ce que l'on peut observer sur la figure 3.42 où sont comparées les contributions exactes et modélisées pour les direction axiale et transverse à 5 et $20D_0$. Mais les erreurs de modélisations telles que nous les avons définies restent élevées, et il serait intéressant de tester d'autres modélisations, par exemple le modèle mixte de Bardina *et al* [3], afin de voir s'il n'est pas possible d'obtenir de meilleurs résultats dans ce cadre.

De plus, la suite nous a montré qu'il est difficile de statuer de façon formelle sur la qualité des modélisations, une fois intégrées dans un solveur à partir de ces tests *a priori*.

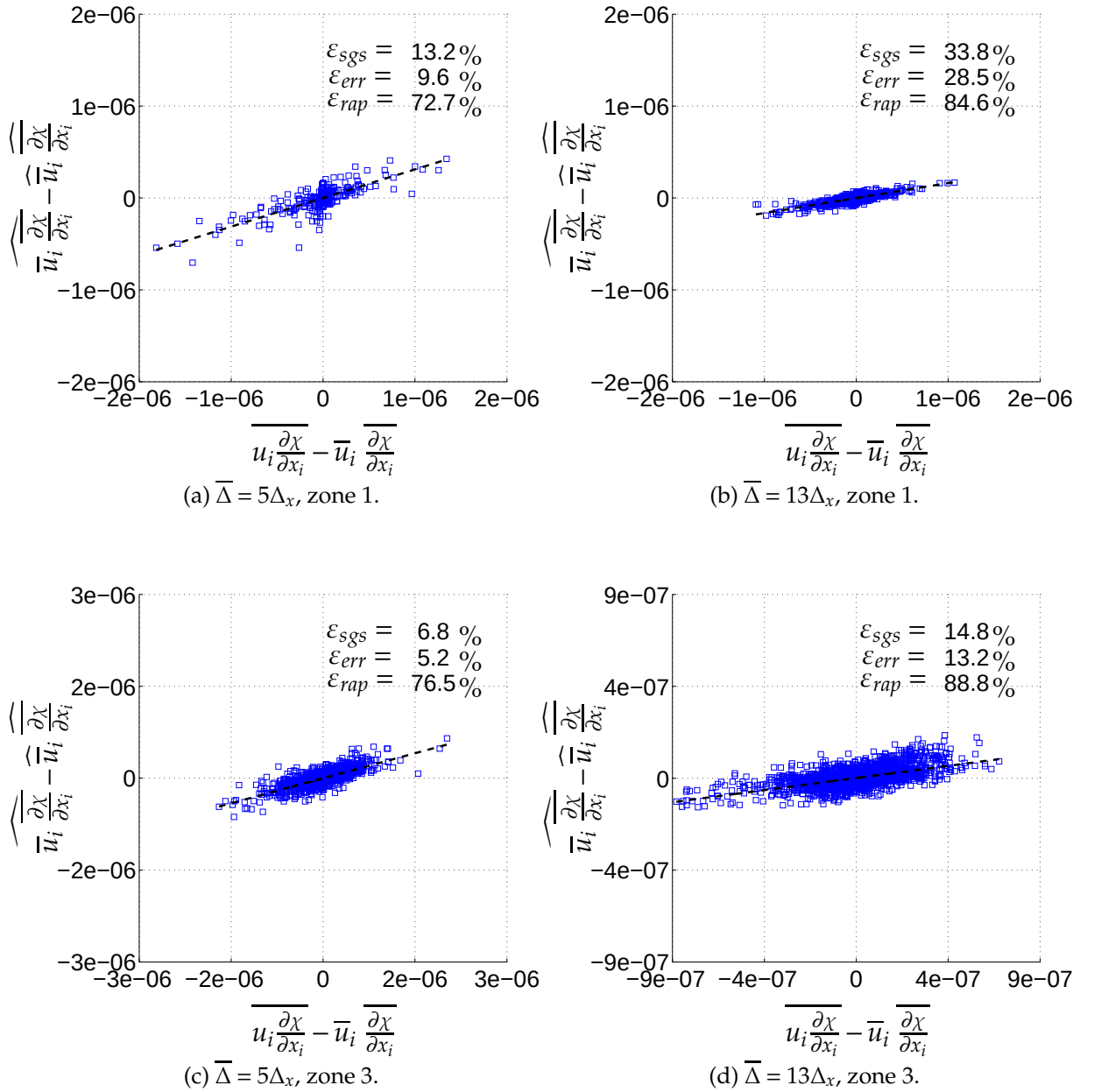


FIGURE 3.41 – Résultats pour le modèle de similarité d'échelles pour le terme interfaciel.

En effet, il s'est révélé que la résolution de l'équation de transport de la quantité de mouvement, contenant le modèle de similarité d'échelles, dans un solveur Navier-Stokes conduisait, dans le cas d'une simulation de l'atomisation, à des résultats fortement instables. Et nous n'avons jamais réussi à obtenir de résultats satisfaisants avec cette modélisation. Ceci signifie que, soit c'est un problème purement numérique, soit le modèle de similarité d'échelles induit des phénomènes non physiques, ce que les tests de sous maille ne nous ont pas permis de détecter.

En fait, il est possible de relever dans la littérature, que certains modèles, affichant de très bonnes corrélations termes modèles/termes exactes dans le cadre de tests *a priori*, conduisent à des instabilités une fois intégrés dans un solveur LES. C'est notamment le cas de Vreman *et al* [136, 137], avec le modèle de similarité d'échelles, dans le cadre monophasique, où les auteurs expliquent que la dissipation turbulente semble ne pas être suffisante. *A contrario*, il existe des exemples de cas où des modèles conduisent à de mauvaises corrélations dans le cadre de tests *a priori*, et pourtant permettent d'obtenir de bons résultats au sein d'un solveur LES. Ce fait a, par exemple, été montré par Meneveau [92] ou encore Reynolds [108].

Il faut donc interpréter les résultats de ces tests *a priori* avec précaution. En effet, il convient de souligner que cette technique d'extraction à partir de champs DNS contient quelques limitations, énoncées ci dessous :

- I. La validité des résultats issus de ces tests ne vaut que pour le nombre de Reynolds du cas DNS initial. En outre, cela ne garanti pas qu'un modèle fonctionnera avec un nombre de Reynolds supérieur de l'écoulement.
- II. Les interactions entre les différentes structures de l'écoulement ne sont pas prises en compte dans ces tests. En conséquence de quoi, l'accumulation d'erreurs du modèle, sur des temps de simulation longs, peuvent difficilement être évaluées. Ceci met indirectement en cause le fait que dans ces tests de sous maille on cherche à un instant donné t de la DNS si les contributions de sous maille modélisées reproduisent fidèlement les contributions exactes relevées en chaque point de l'espace. Or, ce n'est peut-être pas ce qui garanti qu'un modèle va fonctionner, *a posteriori*, dans un solveur LES. Il faudrait pour cela pouvoir, par exemple, tester le comportement des termes de sous maille modélisés, au cours d'une simulation DNS et évaluer si cette modélisation comporte un biais systématique qui l'éloignerait de la solution recherchée. Ce qui nécessiterait des investigations trop longues dans le cadre de ce travail.
- III. Un dernier point concerne la définition des critères de choix qui permettent de statuer sur la validité, ou non, d'un modèle de sous maille à partir de ces tests *a priori* :
 - Soit il existe un modèle avec 0% d'erreur capable de reproduire localement et instantanément la contribution de sous maille. Ce que nous n'avons pas trouvé.
 - Soit il faut se baser sur des critères moins restrictifs et par exemple considérer que les modélisations doivent seulement reproduire en moyenne, sur des temps suffisamment longs, l'effet des termes de sous maille réels. Ce qui rejoint quelque peu la notion de modélisations « fonctionnelles » introduite par Sagaut [109],

tel le modèle de Smagorinsky, qui cherche à reproduire les effets des termes de sous maille sans pour autant tenter de reproduire la forme exacte du tenseur de sous maille. Ce qui pourrait expliquer que ce modèle soit moins bon instantanément que le modèle de similarité d'échelles mais mène à de bons résultats *a posteriori*. Néanmoins, nous avons pu noter que les ordres de grandeur des différents termes modélisés avec ce modèle, restaient proches de ceux des termes exacts issus de la DNS, sans toutefois les reproduire de façon exacte localement et instantanément. Ce qui laisse présager que ce modèle pourrait reproduire la statistique des tenseurs de sous maille. Une fois de plus, seule une étude dynamique à partir d'une DNS pourrait permettre de vérifier ce point.

Au final, se pose alors la question de l'intérêt de ces analyses *a priori* face aux différents constats que nous venons d'énoncer. En fait, ces remarques n'invalident pas les résultats obtenus dans cette section, mais permettent définir un cadre pour énoncer nos conclusions et ainsi ne pas aller au-delà de ce que l'on peut obtenir de ces analyses telles que nous les avons conduites. Ainsi on peut conclure que, les tests des deux modélisations sur un champ instantané à partir d'une DNS d'un jet d'atomisation liquide/gaz montrent que le modèle de similarité d'échelles tend à mieux reproduire la contribution des termes de sous maille que la modélisation de Smagorinsky, dynamique ou non. À ce point de la thèse et basé sur ces conclusions, nous avons donc décidé d'utiliser le modèle de similarité d'échelles dans la suite des travaux afin de développer un modèle LES d'atomisation. Il se trouve que ce choix s'est révélé judicieux pour le terme interfacial, τ_χ , mais rend les simulations instables vis-à-vis de la résolution de l'équation de transport de la quantité de mouvement.

3.6 Conclusions

Dans un premier temps, nous avons rappelé les notions et les hypothèses qui sous-tendent la simulation des grandes échelles. Ensuite, après avoir introduit l'opération de filtrage, fondamentale en LES, puis présenté quelques filtres fréquemment utilisés dans ce formalisme, nous avons mis en évidence que l'application de cette opération sur les équations de transport des variables hydrodynamiques induisait l'apparition de termes de sous maille. Alors que de manière classique en monophasique, on relève la présence d'un unique terme de sous maille, τ_{ij} , les équations monofluides filtrées, décrivant un écoulement à plusieurs phases, présentent quatre termes de sous maille qui sont donc, pour la plupart, inhérents à l'aspect diphasique. Ces termes non fermés rendent compte des corrélations entre les grandeurs de l'écoulement dont les échelles spatiales sont inférieures à la taille du filtre et requièrent une modélisation. Quelques modélisations classiquement utilisées dans le cadre monophasique ont ainsi été détaillées, à savoir le modèle de Smagorinsky et le modèle de similarité d'échelles. Afin d'estimer si ces modèles pouvaient être étendus dans le cadre de la simulation d'un jet d'atomisation liquide/gaz, des analyses *a priori* sur une DNS d'atomisation liquide/gaz ont été conduites. Ainsi, beaucoup de résultats intéressants ont été obtenus à partir cette analyse. L'étude sur les grandeurs turbulentes a permis de caractériser la répartition

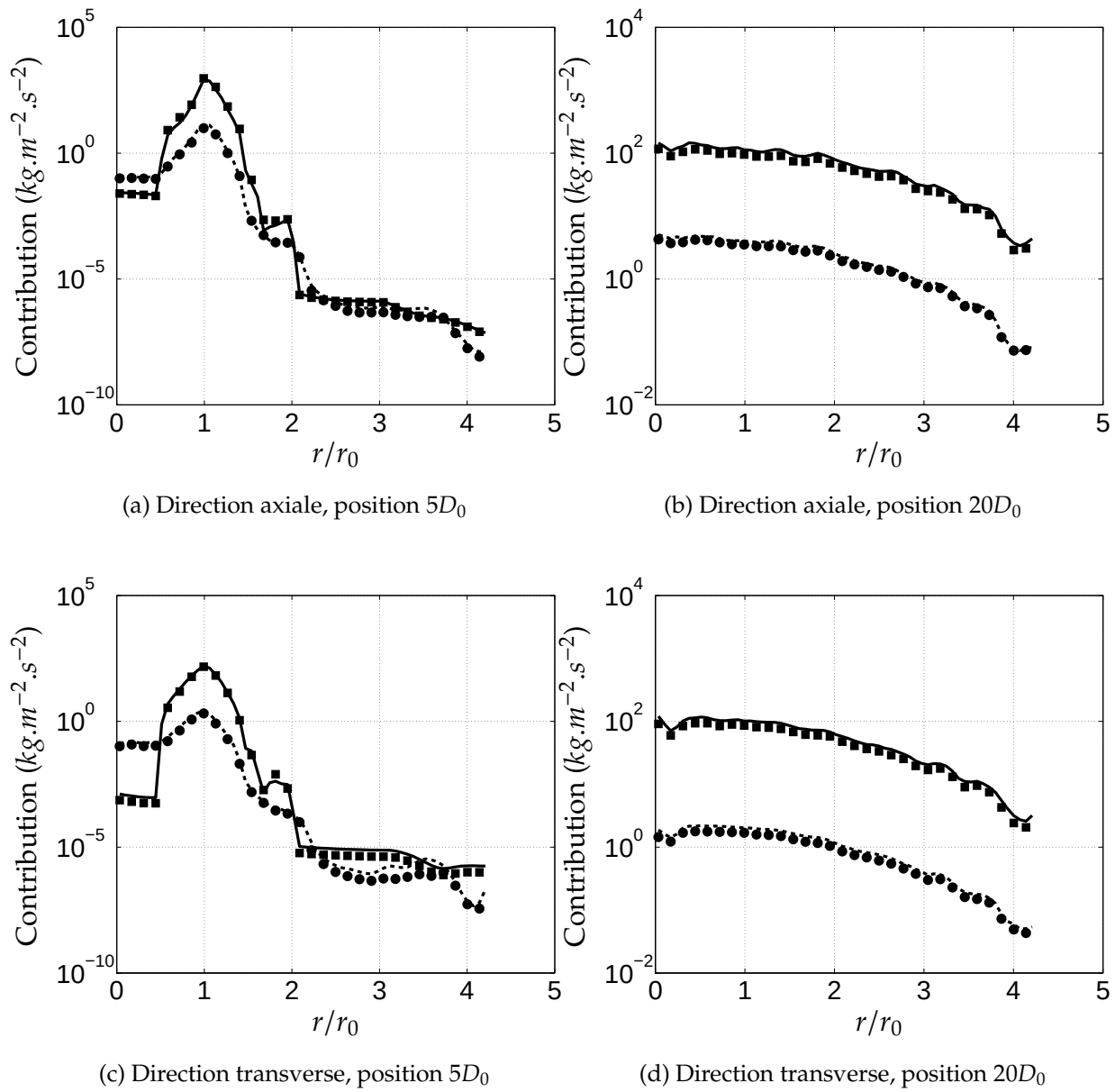


FIGURE 3.42 – Comparaison des termes de sous maille réel, temporel $\tau_{\rho u_i}$ et convectif $\tau_{\rho u_i u_j}$ avec le modèle de Similarité d'échelles.

spatiale de l'énergie cinétique turbulente et de la dissipation. La zone proche injecteur est fortement inhomogène et les pics de production et de dissipation de l'énergie cinétique turbulente se situent proche interface, là où le cisaillement est maximal. Dans la zone atomisée (zone 3), le champ de vitesse est plus homogène est c'est dans cette zone que l'on observe le plus fort de la production d'énergie turbulente, alors que la dissipation reste faible. Le calcul du spectre d'énergie cinétique à également permis de déterminer les fréquences de coupures des filtres qu'il est possible d'envisager.

Ensuite, la hiérarchisation des termes de sous maille a permis de montrer que le terme de sous maille diffusif et celui issu du terme de tension de surface étaient négligeables face à la contribution des termes convectifs et temporels au sein de l'équation de transport de la quantité de mouvement. Nous avons donc voulu savoir dans quelle mesure les deux modèles proposés étaient à même de fermer ces termes. S'appuyant une nouvelle fois sur les données DNS, et même si ces tests laissent quelques questions ouvertes, nous avons pu relever que le modèle de similarité d'échelles, dans le cadre de ces tests de sous maille, semblait mieux adapté que le modèle de Smagorinsky pour décrire les contributions de sous maille.

Chapitre 4

Développement d'un modèle d'atomisation pour la LES

DANS ce chapitre est détaillé le développement d'un modèle Eulérien de simulation aux grandes échelles spécifiquement dédié à l'atomisation liquide. Après une revue des possibilités offertes, on montrera la nécessité de prendre en compte les termes de sous maille inhérents au formalisme diphasique. En outre, dans le cas de l'atomisation, l'utilisation des méthodes de type LES/VOF, associant la modélisation LES seulement pour le terme de sous maille convectif et les méthodes de suivi d'interface développées dans le cadre DNS, ne sont pas suffisantes. Ceci étant dû en partie aux modèles de suivi d'interface utilisés en DNS du type VOF ou level-set qui sont construits pour conserver une description de l'interface liquide/gaz au niveau des mailles de calcul, et donc ne permettent pas de décrire les structures de sous maille, ce que l'on nommera le spray de sous maille.

Basé sur ces conclusions et sur les tests de sous maille réalisés dans le chapitre précédent, on propose ici un modèle complet d'atomisation en LES. Capable, d'une part, de bien décrire l'interface liquide/gaz lorsque celle-ci est bien résolue par le maillage et passant à une vision du spray de sous maille lorsque les échelles des structures ne permettent plus une résolution explicite de celles-ci. Le modèle offre également une description topologique du spray de sous maille grâce à l'utilisation de la fonction densité d'interface.

4.1 Problématiques liquide/gaz pour la LES

Même si la LES est particulièrement bien développée dans le cadre monophasique et principalement dans les cas gazeux, la considération d'un écoulement liquide/gaz conduit à des problématiques bien particulières. D'une part, par rapport aux cas purement gazeux ou purement liquides, le filtrage des équations monofluides fait apparaître des termes de sous maille supplémentaires. C'est ce que nous avons vu et étudié au chapitre précédent.

D'autre part, d'un point de vue pratique, une autre problématique est celle de la méthode de suivi d'interface qui influe de façon significative sur la prise en compte

des sauts des variables à travers l'interface et de la tension de surface à l'interface liquide/gaz. On dispose pour ce faire d'outils numériques de suivi d'interface, développés dans le cadre DNS, permettant de résoudre le transport de l'interface liquide/gaz de façon explicite sur les mailles de calcul. On peut citer à titre d'exemple les méthodes VOF [112], level-set [124], front-tracking [128] ou encore toutes les combinaisons possibles de ces 3 méthodes de base. A titre d'exemple on pourra citer les travaux de thèse de Ménard [90] qui a développé une méthode couplée VOF/level-set, présentée précédemment dans ce mémoire. Ces méthodes permettent de prendre en compte les sauts à l'interface liquide/gaz. Elles permettent également de prendre en compte la force de tension de surface. De manière générale, les méthodes de suivi d'interface utilisées dans les solveurs Eulériens font appel à des procédures qui cherchent à résoudre de manière explicite sur le maillage, une équation du type :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial U_i^\Gamma C}{\partial x_i} = 0 , \quad (4.1)$$

avec C la fonction indicatrice de phase, qui peut être ici soit la fraction de volume soit la fonction level-Set. U_i^Γ est la vitesse de l'interface. Dans un cas sans évaporation, la vitesse de l'interface est directement égale à la vitesse des phases à l'interface : $U_i^\Gamma = u_i$. Il vient alors :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial u_i C}{\partial x_i} = 0 . \quad (4.2)$$

Typiquement, c'est l'équation obtenue pour le transport de la fraction de volume Φ_k qui renseigne sur le taux de remplissage d'un volume de contrôle par la phase k , tel que :

$$\Phi_k = \frac{\text{Volume de la phase } k}{\text{Volume de contrôle}} . \quad (4.3)$$

Ces méthodes de suivi d'interface attachent une importance particulière à garder une vision discontinue de l'interface. D'un point de vue pratique, la difficulté est d'empêcher le phénomène de diffusion numérique de cette fonction d'interface. Il faut contrer explicitement la propension naturelle des schémas numériques à diffuser. La résolution de l'équation 4.2 implique une forte corrélation entre les échelles minimales de l'interface que la méthode peut résoudre et la taille des cellules de calcul. Clairement, l'échelle minimale l_{min} de résolution est de l'ordre Δ , la taille de la maille de calcul :

$$l_{min} \simeq \sqrt[3]{\Delta_x \Delta_y \Delta_z} , \quad (4.4)$$

avec Δ_x, Δ_y et Δ_z les dimensions spatiales de la maille dans les 3 directions de l'espace.

Il est possible d'illustrer ce phénomène grâce à une étude menée dans la thèse de Ménard [90]. Sur la figure 4.1 est tracée la PDF numérique de taille de gouttes obtenue pour 2 simulations d'atomisation liquide/gaz. La différence entre ces 2 cas réside uniquement dans le niveau de raffinement des maillages utilisés. La courbe en pointillés correspond à la PDF de taille de gouttes obtenue avec un maillage

128x128x896, la courbe pleine avec un maillage raffiné 2 fois dans toutes les directions, soit : 256x256x2048.

Ces courbes montrent que le pic de la PDF de taille de gouttes est situé à environ 2 fois la taille de la maille, Δ , dans les 2 cas. On voit clairement qu'en raffinant le maillage le pic de la PDF s'est déplacé vers les plus petites échelles. L'auteur indique, entre autre, que les filaments et les nappes se rompent quand leur dimension la plus faible atteint la taille de la maille. Par exemple, si un filament est d'une épaisseur équivalente à la taille de la maille, alors la cassure de ce filament crée des gouttes de l'ordre de la taille de la maille. Ainsi, le processus de formation des gouttes peut être, dans certain cas, purement numérique, notamment lorsque les structures initiales sont mal décrites par le maillage. Ce problème de « sous-résolution » des structures liquides a également été souligné par Leboissetier [68] dans sa thèse ou encore De Villier *et al* [23] dans leur simulation LES d'atomisation. Ces derniers préconisent notamment que pour pouvoir décrire une goutte de façon réaliste il faudrait au minimum 3 mailles. Ainsi, en DNS, il faut donc s'assurer de pouvoir résoudre toutes les échelles de l'interface.

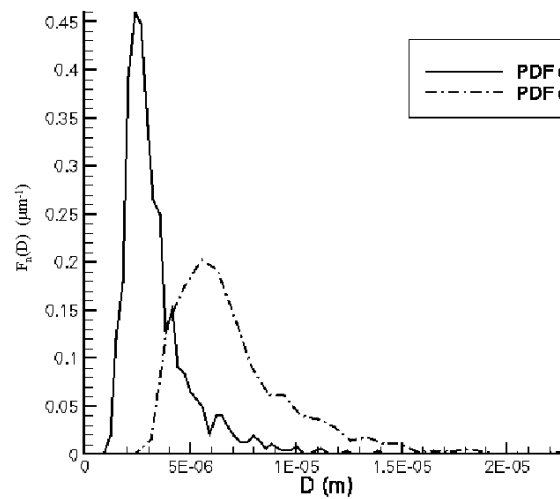


FIGURE 4.1 – PDF de tailles de gouttes obtenue dans le cadre DNS [90]. Cas 1 : mesh 128²x896. Cas 3 : 256²x2048.

Même en limitant la tension de surface, en respectant la valeur critique du nombre de Weber gazeux, la taille des gouttes peut, malgré tout, être plus petite que l'échelle de résolution. En effet, Ménard *et al* [91], par exemple, proposent d'utiliser un nombre de Weber critique gazeux afin de définir la taille de leur maille de calcul, $We_{Gc} = \frac{\rho_G U_{max}^2 D_{gc}}{\sigma} = 10$. En dessous de cette valeur les gouttes ne sont plus supposées s'atomiser sous l'effet de l'écoulement gazeux. En remplaçant, D_{gc} par Δ la taille de la maille, les auteurs obtiennent une valeur de coefficient de tension de surface σ de sorte que la taille minimale des gouttes créées par turbulence doit être Δ . Mais ce Weber critique gazeux ne rend pas compte de tous les phénomènes menant à la formation de gouttes. En outre,

la rupture des filaments et des films liquides ou encore les interactions gouttes/gouttes peuvent mener à des gouttes dont le rayon est bien inférieur à celui prédit par ce nombre de Weber critique.

On comprend dès lors que l'application directe de ces méthodes de suivi d'interface continue à poser des problèmes et cela est d'autant plus vrai dans le cas de la LES. En effet, dans la mesure où l'on cherche dans ce cas à résoudre les échelles de l'ordre de la taille du filtre, $\bar{\Delta}$, aussi bien en terme de turbulence qu'en terme de description de l'interface liquide/gaz, on voit mal comment des méthodes de résolution directe, appliquées en LES, pourrait contourner ce problème de « sous résolution ». En effet, on cherche à faire en sorte que la taille du noyau de convolution, $\bar{\Delta}$, soit telle que :

$$\bar{\Delta} \sim \Delta_{LES} \geq \Delta_{DNS} , \quad (4.5)$$

avec Δ_{LES} la taille du maillage LES et Δ_{DNS} la taille du maillage DNS. Néanmoins, on peut repérer 2 cas limites pour l'atomisation LES :

- I. L'interface peut être bien représentée par le maillage. À ces endroits, la LES doit rejoindre les résultats des méthodes classiques utilisées en DNS comme les méthodes VOF [112] ou level-set [124], cette situation est représentée sur la figure 4.2(a), où les échelles de courbure restent supérieures à la taille d'une cellule de calcul.
- II. Le maillage ne permet plus de suivre fidèlement l'interface, lors de la création de plissements inférieurs à la taille d'une maille $\bar{\Delta}$. Dans ce cas, le calcul doit reproduire les résultats d'une LES considérant des structures et des gouttes inférieures à la taille de la maille. Sur la figure 4.2(b) les gouttes et les inclusions de l'interface ont une échelle inférieure à la taille de la cellule de calcul, Δ_x , et donc ne peuvent plus être résolues directement sur le maillage LES.

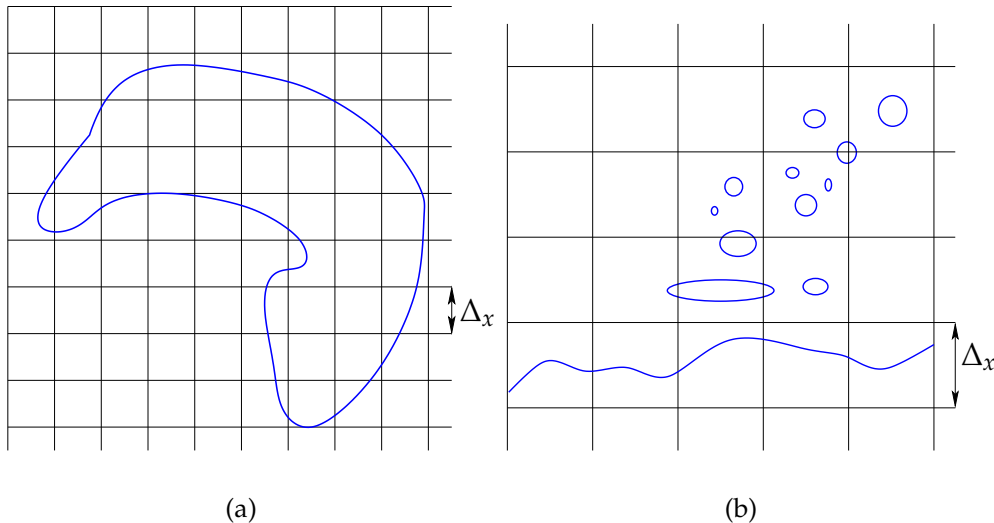


FIGURE 4.2 – Schématisation des 2 cas limites repérés en LES pour le suivi d'interface. En (a) l'interface est bien résolue, en (b) il existe des structures de sous maille.

De fait, la distinction entre ces 2 cas limites est d'importance, car la force de tension de surface doit, dans le cas **I**, pouvoir s'exprimer en fonction des grandeurs résolues. *A contrario* dans le cas **II**, bien que les structures liquides et les gouttes soient toujours sous l'influence locale de la force de tension de surface, l'effet de cette force tend à disparaître au niveau global de la maille de calcul. Il en va de même pour les sauts de grandeurs physiques. Dans le cas **I**, il existe un saut à l'interface résolue, celle-ci est équivalente à l'interface réelle contrairement au cas **II**. Cette situation est résumée sur le tableau 4.1 pour les 2 cas limites **I** et **II**.

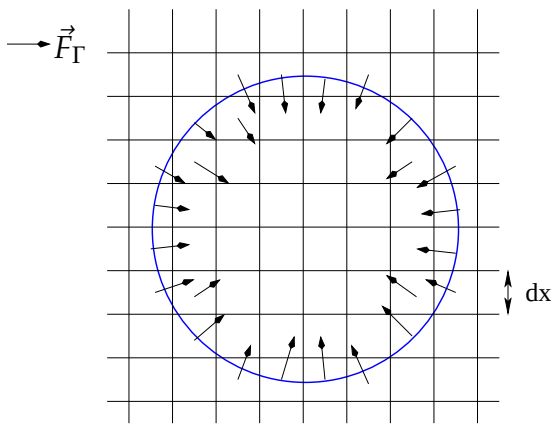
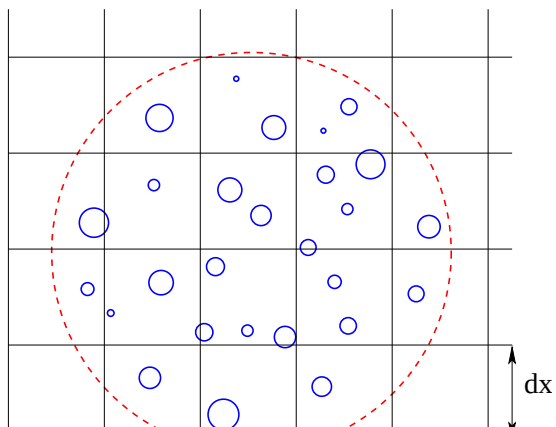
Cas limite I : L'interface est bien résolue par le maillage, auquel cas la tension de surface doit être prise en compte ainsi que les sauts à travers l'interface  Champs de vecteur de force de tension de surface $\vec{F}_\Gamma$ agissant sur une goutte résolue	Cas limite II : Si les structures sont sous résolues, alors la tension de surface joue un rôle local sur une goutte mais ne doit pas jouer de manière globale  Globalement ici la tension de surface n'agit pas à l'échelle de la maille de calcul
--	--

TABLE 4.1 – Traitement des discontinuités et de la tension de surface dans les cas limites **I** et **II**.

Au final, un modèle LES d'atomisation devrait être capable de rejoindre ces 2 limites.

4.1.1 L'approche LES standard appliquée au cas liquide/gaz

La première approche que l'on peut utiliser afin de simuler un écoulement liquide/gaz en LES est de considérer que toutes les échelles de l'interface sont résolues (cas **I**). C'est la solution choisie par De Villier *et al* [23] et Buonfiglioli *et al* [14] dans le cadre de leurs simulations LES de l'atomisation liquide/gaz. Dans cette approche LES, l'interface liquide/gaz est prise en compte grâce à des formulations du type VOF [41]

car on cherche à résoudre l'interface de façon explicite sur le maillage. Formellement, cela revient à utiliser l'approximation suivante :

$$\tau_\chi \simeq 0 . \quad (4.6)$$

Même si les échelles de l'interface sont résolues, celles de la turbulence, l_t , peuvent être « sous-résolues » : $l_t < \bar{\Delta}$. Ce cas a un intérêt pratique, par exemple si l'on considère l'écoulement gazeux autour de la houle de l'océan. Dans ce cas les termes de sous maille existent pour la vitesse afin de dissiper l'énergie turbulente aux petites échelles. Ainsi seul le terme de sous maille convectif, $\tau_{\rho u_i u_j} = \overline{\rho u_i u_j} - \bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j$, présent dans l'équation de transport de la quantité de mouvement, reste important pour la modélisation.

Clairement, cette approche revient donc à utiliser le formalisme LES monophasique, développé et validé depuis de nombreuses années [120], et combiné au formalisme VOF (ou une autre méthode de suivi d'interface) utilisé dans le cadre des DNS [112]. Ainsi, si l'on suppose que les modèles de sous maille utilisés en milieux monophasiques sont toujours valables, cette solution ne nécessite pas de développement de modèle en amont. On cherchera donc dans ce cadre à résoudre le système d'équations suivant :

- Bilan de masse filtré :

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 . \quad (4.7)$$

- Bilan de quantité de mouvement :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j + \tau_{\rho u_i u_j}}{\partial x_j} = - \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{D}_{ij}}{\partial x_j} - \sigma \bar{\kappa} \bar{n}_i \delta_\Gamma . \quad (4.8)$$

Celle-ci équivaut à l'équation 3.34 vue au chapitre précédent dans le cadre monophasique à laquelle a été ajoutée la contribution de la force de tension de surface considérée résolue : $\sigma \bar{\kappa} \bar{n}_i \delta_\Gamma$.

- Evolution de l'interface

$$\frac{\partial \bar{\chi}_k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_i \bar{\chi}_k}{\partial x_i} = 0 . \quad (4.9)$$

De cette façon, l'échelle spatiale minimale à laquelle on peut espérer obtenir des informations est de l'ordre de $\bar{\Delta}$, la taille du filtre LES. Cette approche peut se justifier lorsque les échelles de courbure restent supérieures à $\bar{\Delta}$, par exemple pour les simulations de houle en LES [42, 81, 19]. Elle devient problématique au regard de l'atomisation, notamment dans la phase dispersée, lorsque les gouttes sont plus petites que la taille de la maille LES. On va donc chercher à savoir dans un premier temps si cette approche que nous appellerons « standard » est suffisante pour l'atomisation dans le cadre du formalisme LES.

Figure	Type	SGS qté de mouvement	SGS interface	Maillage
4.4(a)	DNS référence	non	non	128x128x1024
4.4(b)	LES Standard	Smagorinsky	non	64x64x512
4.4(c)	LES Standard	Smagorinsky	non	32x32x256
4.6(a)	DNS	non	non	64x64x512
4.6(b)	DNS	non	non	32x32x256

TABLE 4.2 – Cas tests.

4.1.1.1 Description des structures

On propose ici des cas tests afin de montrer, de façon qualitative dans un premier temps, que l'application de l'approche LES standard n'est pas suffisante dans le cas de l'atomisation. L'idée est donc d'utiliser le code ARCHER [90] muni d'un modèle uniquement pour le terme de sous maille convectif de l'équation de transport de la quantité de mouvement, $\tau_{\rho u_i u_j}$. A l'instar de Devillier *et al* [23] ou encore Buonfiglioli *et al* [14], ce terme est modélisé grâce au modèle classique de Smagorinsky [120]. Dans les 3 cas suivant, la méthode de suivi d'interface utilise le formalisme DNS VOF/Level-Set. C'est-à-dire que l'interface est localisée et transportée de manière précise au sein de chaque maille. Ainsi, un modèle LES pour la turbulence est présent mais l'interface est considérée résolue sur le maillage LES. Deux simulations LES ont donc été conduites afin de rendre compte de l'influence du maillage. Deux cas similaires en maillage, utilisant le formalisme DNS, ont également été simulés afin d'identifier l'impact du terme de sous maille convectif. Il convient de préciser ici que ces deux dernier cas utilisent le formalisme et les méthodes DNS pour la vitesse, mais ne peuvent pas être considérés comme parfaitement résolus. Enfin les résultats sont comparés à un cas DNS de référence mieux résolu (avec un maillage de $128^2 \times 1024$). Les cas ainsi que les modèles sont résumés dans le tableau 4.2.

Le domaine de calcul, présenté sur la figure 4.3, est une boîte de dimension $L_x = L_y = 3D$ et $L_z = 20D$, avec D le diamètre du jet liquide, celui-ci valant $100\mu m$. Enfin les paramètres physiques sont résumés dans le tableau 4.3

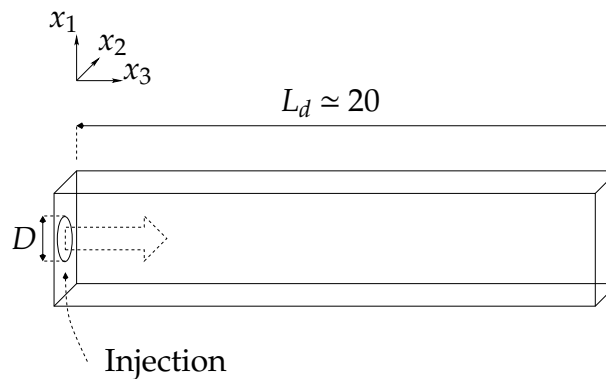


FIGURE 4.3 – Domaine de calcul.

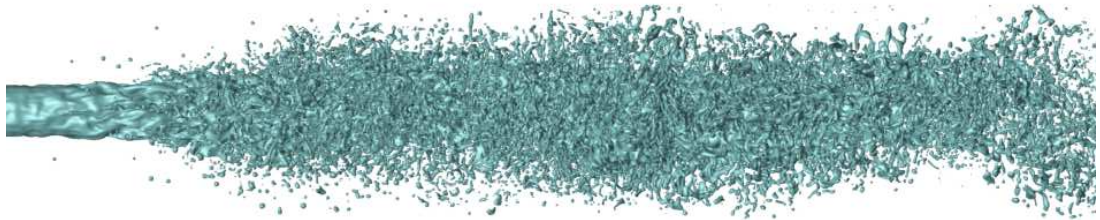
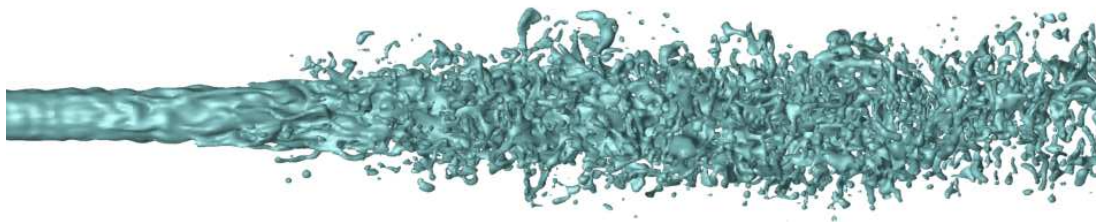
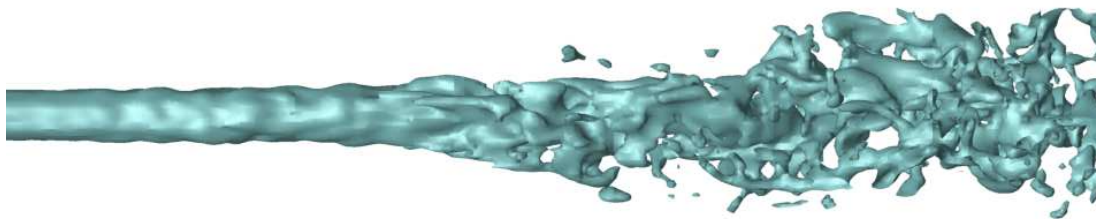
Paramètres	Symbole/Unité	Valeurs
Masse volumique gaz	$\rho_g(kg.m^{-3})$	25
Masse volumique liquide	$\rho_l(kg.m^{-3})$	696
Viscosité gaz	$\mu_g(kg.m^{-1}s^{-1})$	1×10^{-5}
Viscosité liquide	$\mu_l(kg.m^{-1}s^{-1})$	1.18×10^{-3}
Tension de surface	$\sigma(N.m^{-1})$	0.06
Diamètre d'injection	$D_0(\mu m)$	100
Vitesse débitante	$U_d(m.s^{-1})$	79
Reynolds liquide	Re_l	4659
Weber liquide	We_l	7239
Intensité de turbulence	$\overline{u'u'}/U^2$	0.05
Echelle caractéristique de turbulence	$L_t(m)$	$0.1D_0$

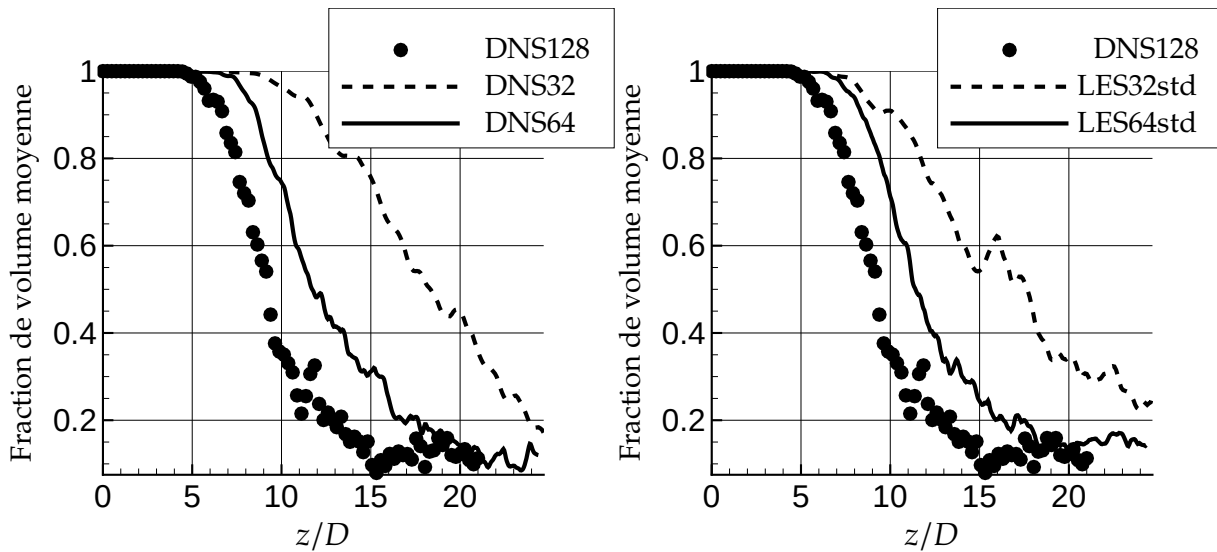
TABLE 4.3 – Paramètres des simulations.

Ces résultats sont présentés sur la figure 4.4 où sont tracées les interfaces liquide/gaz dans les 3 cas pour un jet pleinement développé. Le cas DNS de référence, en 4.4(a), montre les déformations et les déstabilisations initiales de l'interface, puis rapidement la rupture du jet apparaît avec la formation de fines structures liquides. Les comparaisons entre le cas de référence et les résultats LES standard, visibles sur les figures 4.4(b) et 4.4(c), mettent en évidence deux phénomènes :

- Il est clairement visible que la taille minimale des structures résolues dans le cas LES est bien supérieure au cas DNS. En fait, celle-ci est de l'ordre de Δ , la taille d'une cellule de calcul. Le maillage influence cet effet de façon significative, par exemple cas $32^2 \times 256$ standard (figure 4.4(c)) présente des blobs liquides dont la dimension spatiale est environ 2 fois supérieure au cas $64^2 \times 512$ (figure 4.4(c)). Il est également à remarquer que ces structures sont présentes en moins grand nombre.
- La rupture de la colonne liquide se fait plus loin dans l'injection. Cet effet est également fortement influencé par la taille du maillage, la rupture apparaissant d'autant plus loin que le maillage est grossier.

Les résultats observés ici sont à mettre en relation avec la remarque faite dans la section précédente. A savoir que la taille des structures liquides étant limitée par la taille du maillage, à cause de la méthode de suivi d'interface, la rupture en gouttes plus petites n'est plus possible. Ainsi ces structures restent compactes au lieu de se fragmenter comme dans le cas DNS, ce qui explique que la taille des structures résolues augmentent avec la réduction du nombre de mailles. Par conséquent, du fait de leur taille, ces blobs liquides possèdent plus d'inertie et donc, ont tendance à pénétrer plus loin en limitant la dispersion du liquide, ce qui pourrait en partie expliquer le second phénomène. On peut d'ailleurs observer ce phénomène sur la figure 4.5(b) où est tracée la fraction de volume moyenne pour les 3 cas dans la direction de l'axe du jet (z/D). Le cas LES $32^2 \times 256$ présente effectivement une longueur de pénétration supérieure au cas LES $64^2 \times 256$. Néanmoins, on peut tout de même observer que les déstabilisations initiales

(a) DNS, $128^2 \times 1024$ (b) LES standard, $64^2 \times 512$ (c) LES standard, $32^2 \times 256$ **FIGURE 4.4** – Comparaison du Jet DNS [90] et LES standard.



(a) Fraction de volume dans la direction d'injection pour les 3 cas : DNS, DNS64 et DNS32

(b) Fraction de volume dans la direction d'injection pour les 3 cas : DNS, LES64std et LES32std

FIGURE 4.5 – Fraction de volume : Influence du maillage (a) avec utilisation de la méthode DNS sur différents maillages, (b) ajout du modèle de Smagorinsky en 32 et 64.

de la colonne liquide semblent bien décrites près du nez de l'injecteur.

Comme cela a déjà été mis en lumière, cette dépendance au maillage de la description des structures résolues n'est pas un problème spécialement inhérent au formalisme des grandes échelles, et la question se pose déjà dans les simulations DNS diphasiques. Ce problème a été souligné en autre par De Villier *et al* [23], Leboissetier [68] ou encore Ménard [90]. On peut observer le phénomène similaire avec un formalisme totalement DNS sur les figures 4.6(a) et 4.6(b). Ces 2 figures, dont les détails sont présentés sur le tableau 4.2, sont à comparer avec la figure 4.4(a). D'un point de vu quantitatif, la comparaison de la fraction de volume moyenne dans l'axe du jet, figure 4.5(a), donne sensiblement les mêmes résultats que la comparaison avec les cas LES standard.

Au final, les méthodes numériques de suivi d'interface combinées à la vision standard de la LES ne sont pas suffisantes pour les cas d'atomisation présentés. En effet, les longueurs de rupture et la taille des structures limites sont largement conditionnées par le taux de raffinement du maillage. Même si le cas DNS de référence contient certainement quelques structures « sous résolues » compte tenu des échelles induites par la rupture des ligaments, par exemple, ces simulations permettent d'extraire des tendances très claires :

- La longueur de rupture augmente avec la diminution du nombre de mailles dans un même domaine de calcul, et ce, aussi bien avec le formalisme DNS que LES standard.
- La taille minimale des structures résolues augmente également avec l'augmentation de Δ dans les 2 formalismes.

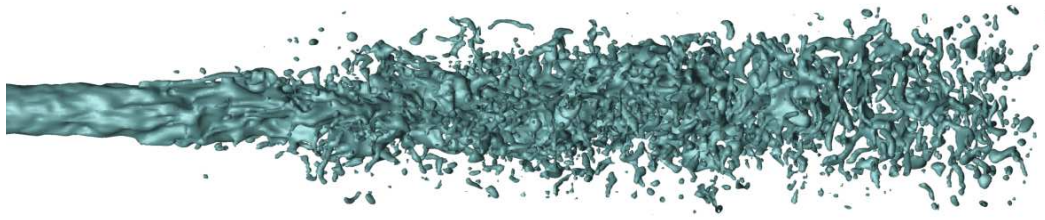
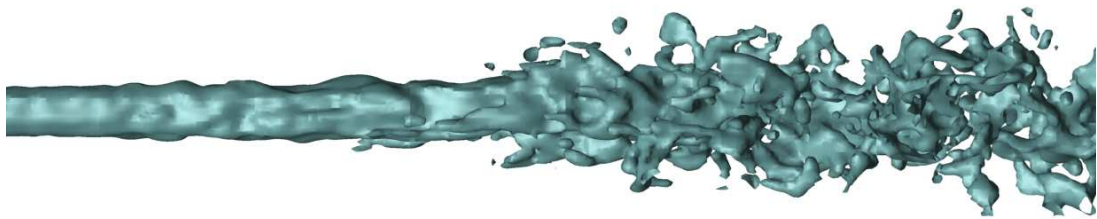
(a) DNS, $64^2 \times 512$ (b) DNS, $32^2 \times 256$

FIGURE 4.6 – Jets obtenu avec le formalisme DNS de suivi d’interface. Influence du maillage.

- L’ajout d’un modèle pour le terme de sous maille convectif $\tau_{\rho u_i u_j}$ n’impacte pas de façon significative les deux dernières remarques. Cependant, on tient à nuancer les propos concernant ce dernier point : il faudrait évaluer la dissipation numérique des schémas de transport car il se peut que, dans tout les cas, le modèle de Smagorinsky [120] n’ait que peut d’impact par rapport à celle-ci.

Pour conclure, les tests menés dans la présente partie mettent en lumière le fait que l’application de la LES standard, dans le cas spécifique de l’atomisation liquide/gaz que l’on cherche à simuler, ne peut pas nous permettre d’obtenir des résultats satisfaisants et ce, même en terme d’écoulement moyen. C’est ce que montre la figure 4.5(b). Il va donc falloir prendre en compte les termes de sous maille LES liquide/gaz et notamment permettre de décrire les structures liquides de sous mailles. En outre, on va montrer l’influence du terme de sous maille τ_χ dans ce contexte.

4.1.2 Influence de τ_χ

Les investigations sur la base de données DNS nous ont permis de quantifier τ_χ , figures 3.23(a), 3.23(b), 3.23(c) et 3.23(d). Il apparait effectivement négligeable devant la contribution de la partie résolue du flux de fraction de liquide dans l’équation 3.63 dans le cas de l’atomisation. Néanmoins, ce terme peut autoriser la diffusion de la fraction de liquide $\bar{\Phi}$. Alors, τ_χ peut être vu comme un terme qui rend compte de la

dispersion de l'interface liquide gaz par le champ de vitesse, celui-ci faisant intervenir une corrélation de sous maille entre u_i et la fraction de volume Φ .

On propose un test à valeur qualitative afin d'identifier l'influence du terme de sous maille τ_χ . Pour ce faire 2 injections identiques, tant en terme de maillage qu'en terme de dimensions spatiales ont été conduites. 2 cas sont alors proposés :

Cas I Dans ce premier cas, le terme τ_χ n'est pas pris en compte, cela revient à dire que l'on résout l'interface sur le maillage LES. Cette interface est visible en noir sur la figure 4.7(a).

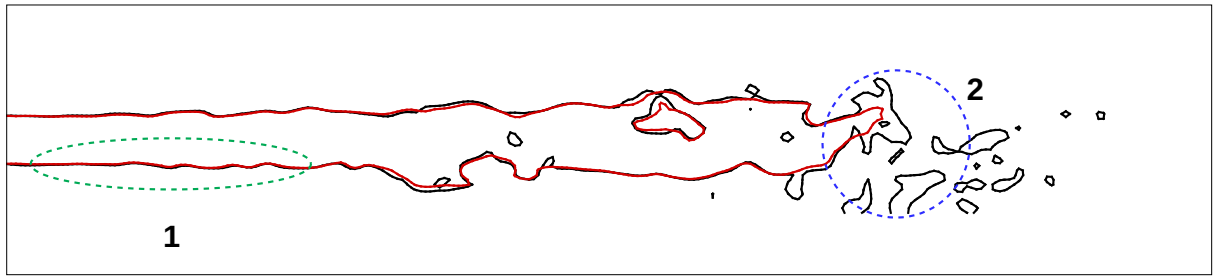
Cas II Dans le deuxième cas, le terme de sous maille est pris en compte, ici grâce au modèle de Bardina *et al* [3]. L'iso- $\overline{\Phi} = 0.5$ est tracée en rouge sur la figure 4.7(a).

Sur la figure 4.7 sont tracées les iso- $\overline{\Phi} = 0.5$ de la fraction de volume résolue dans les deux cas. On peut observer, proche injecteur (zone 1), que les interfaces résolues dans les deux cas sont similaires, ce qui aurait tendance à signifier que l'interface liquide/gaz est bien résolue dans les 2 cas et donc que le terme de sous maille τ_χ a peu d'influence. Néanmoins, plus loin dans l'injection (zone 2) des différences apparaissent. Le cas **I**, où $\tau_\chi = 0$, conduit à la formation de « paquets » liquides dont la dimension spatiale est de l'ordre de Δ , la taille de la maille de calcul. C'est l'effet clairement identifié dans la section précédente, dû à la méthode de suivi d'interface. Dans le cas **II**, où τ_χ est pris en compte, les « paquets » liquides ne sont pas présents. Cependant, on peut remarquer que la fraction de volume résolue a subi un processus de diffusion. Ceci est visible sur la figure 4.7(b) où sont tracés les iso-contours en couleur pour ce dernier cas. Sur cette même figure la fraction de volume dans le cas I, visible en noir, a été reportée à des fins de comparaison. Les « paquets » liquides présents pour les cas I ont, en fait, été diffusés dans le cas II. Ceci signifie que le terme de sous maille τ_χ a joué un rôle tout au long de l'injection pour mener à cette différence visible en zone 2. Cet exemple montre la limite de l'analyse *a priori* à un instant t . En effet, τ_χ est négligeable à un instant donné, mais son effet se cumule dans le temps pour finalement jouer un rôle essentiel dans les processus de diffusion qui font passer le spray de l'échelle résolue à l'échelle de la sous maille.

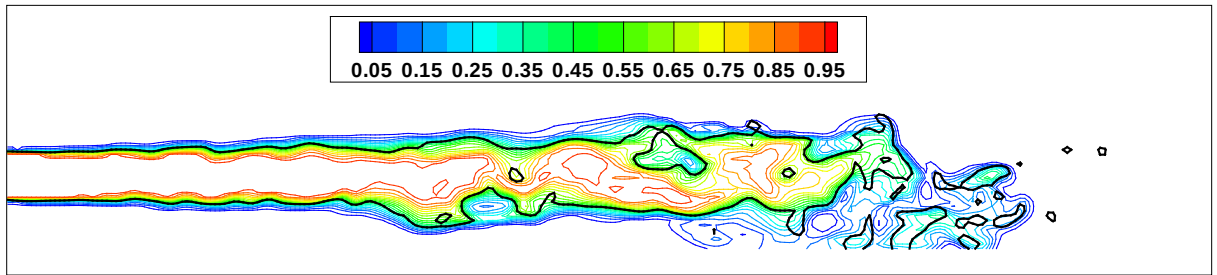
Ainsi la prise en compte du terme τ_χ , peut permettre de rejoindre les 2 limites identifiées sur le tableau 4.1. En effet, lorsque l'interface est bien résolue, comme dans la zone 1 sur la figure 4.7(a), la fraction de volume résolue est alors représentative de l'interface réelle. On rejoint alors le cas limite I du tableau 4.1. Plus loin dans l'injection, en zone 2 sur la figure 4.7(a), la fraction de volume résolue doit correspondre à une vision moyenne de la quantité de liquide au sein d'un volume de contrôle, ce qui rejoint le cas limite II du tableau 4.1. On fera alors appel dans cette zone à la notion de « spray de sous maille ».

4.1.3 Conclusion sur la méthode LES Eulérienne « standard »

Bien évidemment, il faut rester conscient ici, que les comparaisons sont qualitatives. Néanmoins, les tendances sont claires, l'application de la LES « standard » combinée à des méthodes de suivi d'interface dans le cas de l'atomisation ne permet pas de bien décrire ce type d'écoulement au sein du domaine de calcul. Et ceci, tant en terme



(a)



(b)

FIGURE 4.7 – En (a), sont comparés l'iso- $\overline{\Phi} = 0.5$ avec τ_χ négligé (ligne noire) et modélisé (ligne rouge) proche injecteur (en zone 1), les déformations de l'interface sont identiques dans les 2 cas. En zone 2, dans le cas où τ_χ est négligé, l'interface reste sous forme de « paquets liquides ». Si ce terme n'est pas négligé il permet la diffusion du champ de fraction de volume. Ceci est visible en (b).

moyen, par exemple pour la pénétration de la phase liquide, qu'en terme de description topologique du jet d'atomisation. Les structures étant décrites aux niveaux de la maille de calcul et donc sont « sous résolues ». A moins, bien sur, de disposer d'un maillage suffisamment fin, ce qui ne sera pas notre cas. A partir de ces conclusions, il paraît nécessaire de développer un modèle spécifique pour l'atomisation. Permettant, entre autre, de décrire le « spray de sous maille » là où les structures liquides ne peuvent plus être résolues par le maillage LES. Enfin le dernier test conduit semble indiquer que la prise en compte du terme de sous maille de la fraction de volume τ_χ peut jouer en faveur de la description de ce « spray de sous maille ».

4.2 Proposition d'un modèle LES d'atomisation

À la vue des tests conduits dans la section précédente et considérant les tests de sous maille réalisés, il est possible de proposer un modèle d'atomisation spécifiquement dédié au phénomène d'atomisation. Ce modèle devra, en outre, permettre de rejoindre les 2 limites mises en lumière dans le cas de la simulation LES. C'est-à-dire, prendre en compte les sauts et la force de tension de surface au niveau de l'interface liquide/gaz

lorsque celle-ci est bien résolue par le maillage. Et passer continument vers une description globale des structures lorsque celles-ci ont des dimensions inférieures à la taille de la maille LES.

4.2.1 Idée générale du modèle

L'idée du modèle LES d'atomisation peut être résumée sur la figure 4.8. Proche de l'injecteur (zone 1) la zone dense est composée d'un cœur liquide, dont les échelles de longueur sont supérieures à $\bar{\Delta}$, à cet endroit la contribution de sous maille est faible. Il est donc possible d'utiliser une méthode de suivi d'interface de type DNS, c'est la vision discontinue. La fonction de phase permet dans ces zones de calculer les sauts de propriétés physiques (telles ρ et μ) ou encore le saut de pression et la force de tension de surface.

Plus loin dans la phase dispersée (zone 2), les tailles de gouttes sont inférieures à la taille de la maille LES. Il faut revenir à une vision continue, on pourra utiliser les modélisations développées en RANS. Ainsi le but est de disposer d'un modèle prenant en compte la zone dense d'atomisation primaire par une méthode de suivi d'interface. Dans la zone dispersée le spray passe en sous maille, ici une équation de la densité d'interface permettra d'obtenir des informations sur le nuage de gouttes, (leurs tailles et leur répartition spatiale).

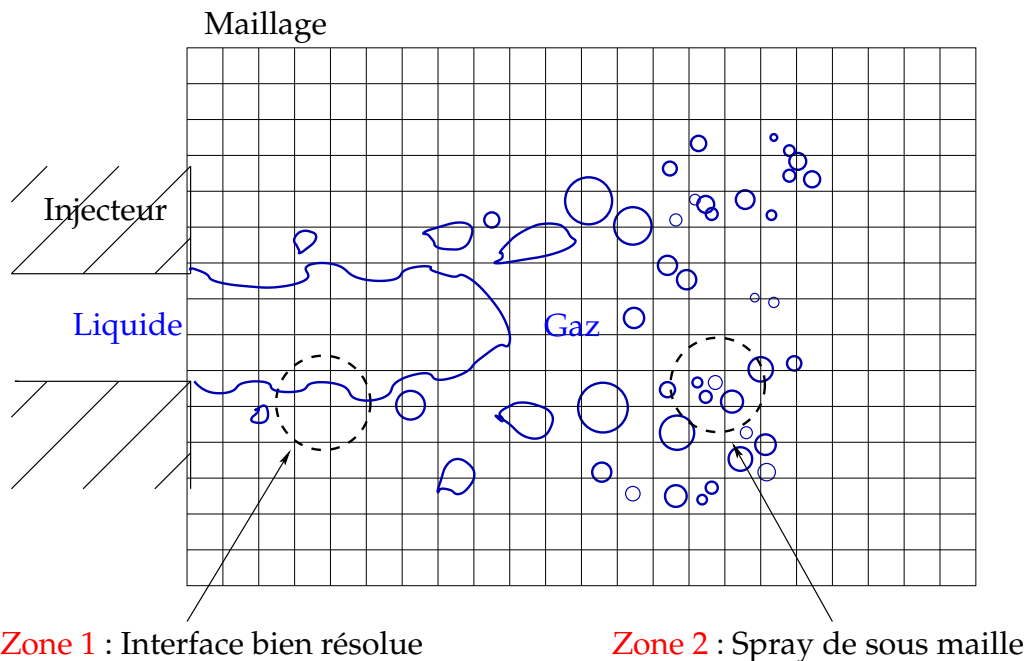


FIGURE 4.8 – Schéma de principe du modèle LES d'atomisation.

4.2.2 Équations de transport

4.2.2.1 Choix des variables à transporter

Afin de remplir les objectifs du modèle, on va chercher à résoudre les équations de transport pour le bilan de masse, la quantité de mouvement et la fraction de volume. On souhaite, notamment, prendre en compte les termes de sous maille pour la quantité de mouvement et la fraction de volume liquide.

Bilan de masse :

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 . \quad (4.10)$$

C'est la seule équation de transport qui ne nécessite pas de modélisation.

Bilan de quantité de mouvement :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \bar{u}_i + \tau_{\rho u_i}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j + \tau_{\rho u_i u_j}}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{D}_{ij}}{\partial x_j} - \sigma \bar{\kappa} \bar{n}_i \delta_\Gamma^r . \quad (4.11)$$

Cette équation de transport nécessite quelques explications : Dans le chapitre 3, les résultats des tests *a priori* ont montrés que les 2 termes de sous maille prépondérants dans cette équation sont le terme temporel, $\tau_{\rho u_i}$ et le terme convectif, $\tau_{\rho u_i u_j}$. On souhaite donc les prendre en compte ici, on explicitera la modélisation utilisée dans la section suivante. En outre, pour rappel, le terme temporel n'est pas pris en compte si l'on cherche à réaliser une résolution standard (c.f. équation 4.8).

Le dernier terme du membre de droite de cette équation correspond à la force de tension de surface que nous allons appeler « résolue ». En effet, au niveau de l'interface résolue, qu'il va falloir définir, la force de tension de surface va être appliquée. δ_Γ^r correspond alors à un pic de Dirac centré sur cette interface, $\bar{n}_i$ est la composante de la normale à cette interface résolue que l'on prendra orientée du gaz vers le liquide dans la direction i et $\bar{\kappa}$ est la courbure de cette interface. En pratique, on va considérer que l'interface résolue se situe dans les mailles de calcul contenant la fraction de volume $\bar{\Phi} = 0.5$, ce qui clairement constitue un choix de modélisation.

Fraction de volume liquide : En pratique on va chercher à transporter la fraction de volume de liquide résolue $\bar{\Phi}$ défini par la relation 4.3. Dans ce cas, le volume de contrôle est défini par le volume contenu par le support du noyau de convolution du filtre. Ce volume est relié au volume de la maille LES, $V_{\text{filtre}} = \bar{\Delta}^3 = \Delta_x \Delta_y \Delta_z$. Il vient alors de façon classique au sein des mailles de calcul :

$$\bar{\rho} = \bar{\Phi} \rho_l + (1 - \bar{\Phi}) \rho_g , \quad (4.12)$$

où ρ_l et ρ_g sont les masses volumiques de liquide et de gaz lorsque que l'on a 100% de liquide ou 100% de gaz respectivement. Dans la même optique on écrira pour la viscosité dynamique $\bar{\mu}$:

$$\bar{\mu} = \bar{\Phi}\mu_l + (1 - \bar{\Phi})\mu_g . \quad (4.13)$$

L'équation de transport de la fraction de liquide résolue est la suivante :

$$\frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_i \bar{\Phi}}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{\Phi_i}}{\partial x_i} = 0 , \quad (4.14)$$

où $\tau_{\Phi_i} = \overline{u_i \Phi} - \bar{u}_i \bar{\Phi}$. Ce terme de sous maille est à rapprocher du terme de sous maille pour la fonction indicatrice de phase filtrée τ_χ . On le modélisera alors de la même manière. La prise en compte de ce terme de sous maille va alors permettre comme nous l'avons vu dans la section précédente de décrire le spray de sous maille.

4.2.2.2 Modélisation des termes de sous maille

Considérant les études réalisées dans le chapitre 3, on va uniquement chercher à modéliser les termes de sous maille convectif et temporel. Ainsi que le terme présent dans l'équation de transport de la fraction de volume liquide.

Termes de sous maille de l'équation de bilan de la quantité de mouvement :
Comptes tenus des tests de sous maille réalisés au chapitre précédent, l'idéal aurait été de modéliser ces termes grâce au modèle de similarité des échelles, de la manière suivante :

Terme temporel :

$$\tau_{\rho u_i} \simeq C_t (\widehat{\bar{\rho} \bar{u}_i} - \widehat{\bar{\rho}} \widehat{\bar{u}_i}) . \quad (4.15)$$

Terme convectif :

$$\tau_{\rho u_i u_j} \simeq C_c (\widehat{\bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j} - \widehat{\bar{\rho}} \widehat{\bar{u}_i} \widehat{\bar{u}_j}) . \quad (4.16)$$

Néanmoins, on souligne qu'en pratique, les simulations réalisées en utilisant cette modélisation présentent de fortes instabilités numériques. Face à ce constat, il a été décidé d'utiliser un modèle de Smagorinsky [120] pour modéliser la contribution de sous maille de ces deux termes.

Termes de sous maille de l'équation de bilan de la fraction de volume résolue :

Le modèle de similarité des échelles a pu être utilisé pour le terme de sous maille de la fraction de volume résolue, τ_{Φ_i} , dans la mesure où celui-ci n'a pas entraîné de problèmes de stabilité numérique. Cette modélisation s'exprime :

$$\tau_{\Phi_i} \simeq C_\Phi (\widehat{\bar{\Phi} \bar{u}_i} - \widehat{\bar{\Phi}} \widehat{\bar{u}_i}) . \quad (4.17)$$

4.2.2.3 Interface résolue

Lorsque l'interface est bien résolue, on souhaite prendre en compte les discontinuités, ainsi que la force de tension de surface intervenant au niveau de celle-ci. Mais alors il faut un critère qui défini cette interface résolue.

On fait le choix de considérer que l'interface résolue est donnée par la valeur de la fraction de volume liquide 0.5. Plus précisément, on souhaite prendre en compte les sauts et la force de tension de surface au niveau de la surface définie par l'iso- $\bar{\Phi} = 0.5$. La figure 4.9 permet d'explicitier le but de cette approche. En bleu (trait continu) une interface physique Γ est visible alors qu'en rouge (trait tirets-points gras) est représentée l'interface filtrée équivalente. On considère le volume de contrôle Ω d'épaisseur $\bar{\Delta}$, on fera alors l'hypothèse que la somme des forces de tension de surface locale (vecteurs bleus, traits continus) équivaux à la force de tension de surface au niveau de l'interface équivalente (vecteur rouge, trait pointillé).

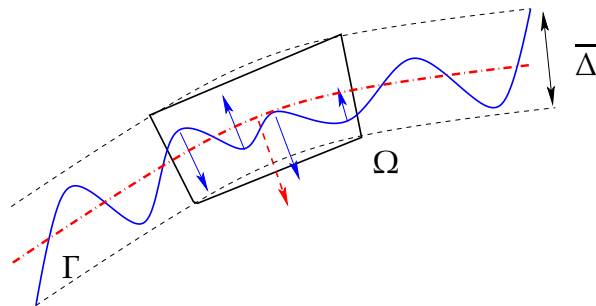


FIGURE 4.9 – Représentation de l'interface résolue dans un volume de contrôle Ω .

Sur ce point Toutant [126], dans sa thèse réalise des tests analytiques sur des gouttes. Il cherche notamment le lien entre la fonction indicatrice de phase moyennée (correspondante pour nous à la fraction de volume résolue) et la position de la discontinuité. Il relève en premier lieu que si l'interface est plane alors l'iso-valeur 0.5 de la fraction de volume correspond exactement à l'interface. Néanmoins, il relève également un lien entre la courbure de l'interface et la valeur de l'iso-valeur de $\bar{\Phi}$ correspondant à l'interface. Plus la surface est courbe, plus cette iso-valeur s'éloigne de 0.5.

Cependant, dans notre cas, on va considérer rester à des valeurs de courbure relativement faibles. On pourra argumenter, entre autre, que le maillage LES ne devrait pas nous permettre d'atteindre des niveaux de courbure élevés. En outre, si la courbure devient élevée alors le liquide devrait être décrit en terme de « spray de sous maille » car le maillage ne pourra plus le décrire explicitement. De plus, les tests réalisés précédemment ont montré que l'iso- $\bar{\Phi} = 0.5$ était suffisante pour décrire les premières déformations de l'interface près du nez de l'injecteur et donc correspond bien à l'interface résolue. Ceci est visible sur en comparant les figures 4.5 (a), (b) et (c).

Un critère sur la quantité d'interface présente au sein du volume de contrôle peut aussi apparaître comme une alternative intéressante. En effet, la connaissance simultanée de la quantité d'interface et de la fraction de volume au sein d'une maille de calcul pourrait permettre de savoir si la fraction de volume correspond plutôt à une interface coupant la maille, auquel cas la quantité d'interface n'est pas loin d'être minimale.

Ou, au contraire, si la fraction de volume correspond plutôt à un nuage de gouttes, la quantité d'interface est alors plus élevée que dans le cas précédent.

4.2.2.4 Description topologique du spray de sous maille

Un des points importants du modèle est la description du spray de sous maille. A ce stade de la description du modèle, celui-ci doit pouvoir rendre compte de la dispersion du liquide au sein du domaine de calcul, mais il ne permet pas, en l'état, d'obtenir des informations topologiques perspicaces sur le spray et les structures de sous maille. Par exemple, en terme de densité de gouttes liquides dans la zone diluée ou encore en terme de diamètres au sein des mailles LES.

C'est pour cette raison que l'on propose de résoudre une équation de transport supplémentaire pour la densité d'interface liquide/gaz. La densité d'interface liquide/gaz renseigne sur la quantité de surface liquide/gaz au sein d'un volume de contrôle. Cette grandeur est donc exprimée en m^2/m^3 . L'équation de transport s'écrit de manière générale :

$$\frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_j \bar{\Sigma}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\bar{\Sigma} (\bar{u}_\alpha - \bar{u}_{\Gamma\alpha})) + \dot{\bar{\Sigma}}. \quad (4.18)$$

C'est une formulation postulée pour la LES, issue des travaux RANS, initiée par Vallet *et al* [129, 130] également utilisée dans les travaux de Lebas *et al* [67]. Celle-ci est basée sur une approche phénoménologique du problème. Hormis les termes de variation temporel et convectif, cette équation contient un terme source $\dot{\bar{\Sigma}}$ qui doit rendre compte des phénomènes menant à la création ou la destruction d'interface en sous maille. Les détails de cette équation seront approfondis dans la section 4.4 ou nous reviendrons plus longuement sur la façon de l'établir dans le cas LES.

4.2.3 Choix d'un solveur numérique

Dans son formalisme de base, la LES résout les équations de transport pour les grandeurs filtrées, c'est-à-dire aux échelles dites résolues. Dans ces équations de conservations sont ajoutés les termes de sous-maille qui peuvent être vus comme des termes sources constituant la contribution énergétique des petites échelles (c.-à-d. inférieures à la maille de calcul). On comprend donc que la vision de la LES ne change pas radicalement la philosophie d'un solveur Navier-Stokes classique. A cela s'ajoute le modèle d'atomisation qui ajoute principalement 2 équations de transport. Il est donc possible d'utiliser les mêmes schémas numériques tant pour la résolution spatiale que temporelle de l'écoulement. La principale difficulté dans notre étude est que notre écoulement comprend 2 phases, liquide-gaz, avec des propriétés physiques variants fortement (ρ ou encore μ).

Il est donc possible d'utiliser un solveur Navier-Stokes préexistant afin d'y ajouter le modèle présenté précédemment. Néanmoins, l'aspect particulier de l'atomisation liquide-gaz ajoute quelques contraintes sur le choix du code de base. Ces contraintes nous ont conduit à établir le « cahier des charges » suivant :

- Diphasique avec ρ et μ fortement variables, prenant en compte la tension de surface.
- Robustesse.
- Rapide, c'est-à-dire optimisé et parallélisé. Ce critère est important car la validation requiert des statistiques convergées et donc de nombreux calculs.
- Modifiable à souhait dans la mesure où l'ajout des termes de sous maille et des nouvelles équations de transports implique des modifications au cœur du solveur.

Dans un premier temps il paraît possible d'utiliser un solveur industriel, muni par exemple du formalisme VOF (avec la méthode VOF-PLIC [112, 41]). En effet, il est souvent possible d'ajouter des routines utilisateur. Afin, entre autre, de prendre en compte les équations de transport supplémentaires. De plus, l'aspect LES est fréquemment intégré à l'équation de transport de la quantité de mouvement. Ces solveurs sont souvent assez rapides et robustes, moyennant une attention particulière sur les méthodes de résolution. Cependant de fortes limitations apparaissent assez rapidement lors du développement d'un modèle. En premier lieu, ces codes sont souvent « fermés », on ne maîtrise pas totalement les schémas numériques. Ce qui ajoute une difficulté lorsque l'on veut caractériser l'effet du modèle par rapport celui des schémas numériques. De plus, dans nos tests sur l'un de ces solveurs la modification de ρ (équation 4.12) est apparue impossible, modification pourtant fondamentale pour le modèle LES d'écoulements liquide/gaz. On conclura donc qu'il est assez difficile d'utiliser un solveur industriel pour le développement de notre modèle.

Le code académique ARCHER, développé au CORIA s'est donc rapidement imposé. C'est un solveur DNS spécifiquement dédié à l'atomisation liquide avec suivi d'interface et déjà utilisé pour l'atomisation. Il a été développé par l'équipe de Berlemont, Tanguy et Ménard [91, 9, 90, 125]. C'est un code parallélisé combinant 2 méthodes de suivi d'interface, à savoir la fonction Level-Set [124] qui permet une reconstruction précise de l'interface et la fonction VOF qui garantit la conservation de la masse. Enfin cette DNS utilise la méthode Ghost Fluid [33] afin de prendre en compte les sauts à la traversée de l'interface. Pour rappel, les données utilisées afin d'évaluer les modèles de sous-maille dans le chapitre 3 sont issues des simulations réalisées par ce solveur.

4.3 Mise en œuvre du modèle dans ARCHER

La décision d'utiliser le solveur ARCHER n'est pas sans conséquence, celui-ci utilisant son propre formalisme. Néanmoins, il est possible de tirer parti de la méthode de suivi d'interface, et c'est d'ailleurs ce qui a motivé notre choix.

4.3.1 Passage à la forme « non conservative »

Les équations que l'on cherche à résoudre sont les équations de transport mono-fluides filtrées munies de leur terme de sous maille. Les modèles présentés l'ont été pour la forme « conservative » de l'équation des moments. Le code ARCHER résolvant, quant à lui, la forme « non conservative », il convient de réécrire quelque peu les équations. L'opération de convolution sur l'équation de conservation de la masse donne :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \bar{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \tau_{\rho u_j}}{\partial x_j} . \quad (4.19)$$

Le développement de cette équation aux dérivées partielles donne :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \bar{\rho} \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_j} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x_j} = -\frac{\partial \tau_{\rho u_j}}{\partial x_j} . \quad (4.20)$$

En notant $\bar{D}_{ij} = \bar{\mu}(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i})$ et $f_i^{int} = \sigma \bar{n}_i \bar{\kappa} \delta_\Gamma^r$. On peut alors réécrire l'équation 4.11 :

$$\bar{\rho} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \bar{u}_i \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \bar{\rho} \bar{u}_i \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_j} + \bar{\rho} \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \bar{u}_i \bar{u}_j \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{D}_{ij}}{\partial x_j} - f_i^{int} - \frac{\partial \tau_{\rho u_i}}{\partial t} - \frac{\partial \tau_{\rho u_i u_j}}{\partial x_j} . \quad (4.21)$$

En injectant l'expression de $\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t}$ de l'équation 4.20 dans cette dernière et en divisant par $\bar{\rho}$ on obtient la forme voulue :

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{D}_{ij}}{\partial x_j} - \frac{1}{\bar{\rho}} f_i^{int} - \underbrace{\frac{1}{\bar{\rho}} \left(\frac{\partial \tau_{\rho u_i}}{\partial t} - \bar{u}_i \frac{\partial \tau_{\rho u_j}}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{\rho u_i u_j}}{\partial x_j} \right)}_{\text{contribution de sous maille}} . \quad (4.22)$$

Cette dernière équation présente alors tous les termes de sous maille.

4.3.2 Aspects numériques

4.3.2.1 Méthode de projection

On présente ici la méthode de résolution des équations Navier-Stokes, c'est celle utilisée dans le solveur ARCHER. C'est une méthode dite de projection de type prédiction/correction. La présentation à ce point de cette méthode de projection est importante car elle fait apparaître une équation de Poisson qu'il faut résoudre, afin d'obtenir le terme de pression. Or, c'est le second membre de cette équation de Poisson qui contiendra les sauts à l'interface. On présente ici de manière générale cette méthode, sur les équations monophasiques.

On cherche donc à résoudre le système composé de la conservation de la quantité de mouvement ainsi que de la masse :

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial D_{ij}}{\partial x_j} + \frac{1}{\rho} F_i , \quad (4.23)$$

avec $D_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$ et

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0 , \quad (4.24)$$

où u_i est la composante du vecteur vitesse dans la direction i , P la pression, ρ et μ sont respectivement la masse volumique et la pression dynamique. Enfin F_i est la composante dans la direction i des forces de volume. Dans la suite, on note avec un exposant n les variables à un instant t et $n + 1$ correspond à un instant $t + dt$.

Connaissant toutes les variables hydrodynamiques à un instant n , P^n , $\vec{u}^n$, correspondant à un temps t , on va chercher à obtenir P^{n+1} et $\vec{u}^{n+1}$ en $t + dt$. Dans une première étape on cherche à résoudre le système constitué des équations de transport de la masse et de la quantité de mouvement sans le terme de pression. On obtient alors une vitesse intermédiaire $u_i^\star$, telle que :

$$u_i^\star = u_i^n + \Delta t \left(-u_j^n \cdot \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial S_{ij}^n}{\partial x_j} + \frac{1}{\rho} F_i^n \right) . \quad (4.25)$$

Cette vitesse $u_i^\star$ ne satisfait pas l'équation de la masse ($\partial u_i^\star / \partial x_i \neq 0$). On cherche à obtenir u_i^{n+1} qui vérifie, $\partial u_i^{n+1} / \partial x_i = 0$. Or, il vient :

$$u_i^{n+1} + \Delta t \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial P^{n+1}}{\partial x_i} \right) = u_i^\star . \quad (4.26)$$

L'application de l'opérateur divergence sur cette dernière relation donne une équation de Poisson permettant de résoudre P^{n+1} :

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial P^{n+1}}{\partial x_i} \right) = \frac{1}{\Delta t} \frac{\partial u_i^\star}{\partial x_i} , \quad (4.27)$$

dans la mesure où la divergence de u^{n+1} est nulle. De cette manière, après avoir résolu cette équation de Poisson, on obtient P^{n+1} . Il est alors possible de trouver la valeur de u_i^{n+1} :

$$u_i^{n+1} = u_i^\star - \Delta t \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial P^{n+1}}{\partial x_i} \right) . \quad (4.28)$$

Au final, le point clé de cette partie est la résolution de l'équation de Poisson. Celle-ci est réalisée à l'aide d'une méthode gradient conjugué préconditionné multigrilles. Les détails de cette méthode pourront être trouvés dans la thèse de Ménard [90], ou encore dans les travaux de Freret [34], qui a développé la méthode pour le code ARCHER. En ce qui concerne la LES, cette méthode projection est directement applicable, il vient :

$$\bar{u}_i^{n+1} = \bar{u}_i^\star - \Delta t \left(\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{P}^{n+1}}{\partial x_i} \right) , \quad (4.29)$$

avec :

$$\bar{u}_i^\star = \bar{u}_i^n + \Delta t \left(-\bar{u}_j^n \cdot \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{D}_{ij}^n}{\partial x_j} + \frac{1}{\bar{\rho}} \bar{F}_i^n \right) . \quad (4.30)$$

Il est à noter que l'on définit toujours pour le modèle LES $\bar{D}_{ij}$ comme :

$$\bar{D}_{ij} = \bar{\mu} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right). \quad (4.31)$$

Ici $\bar{F}_i$ contient les forces volumiques (e.g. la gravité), les contributions de sous maille (c.f. equation 4.22) et la force de tension de surface résolue.

4.3.2.2 Prise en compte des discontinuités à l'interface

Il existe principalement 2 méthodes afin de prendre en compte les discontinuités à l'interface. La méthode Continuous Surface Force (CSF), développée par Brackbill *et al* [13], qui réalise un lissage des discontinuités sur une épaisseur fictive ϵ , en utilisant une approximation numérique des distributions d'Heaviside et de Dirac. Néanmoins, et ce fait est mentionné par Tanguy [125], la variation spatiale des grandeurs physiques ρ et μ est artificielle et dépend complètement du lissage utilisé.

Une alternative consiste à utiliser la méthode *ghost fluid* (ou GFM) qui permet de prendre en compte les discontinuités de manière plus réaliste. C'est la méthode choisie au sein du solveur ARCHER. Développé par Fedkiw *et al* [33, 80, 53], le formalisme *ghost fluid* se fonde sur l'extension continue de chaque coté de l'interface liquide/gaz des variables discontinues. La connaissance des sauts à imposer permet alors de construire des cellules « ghost », ou « fantômes », qui vont permettre la dérivation continue des variables. Ceci est schématisé sur la figure 4.10, en une dimension, où une variable f subi une discontinuité entre les points du maillage de calcul i et $i+1$ où passe l'interface. Connaissant le saut $\llbracket f \rrbracket_\Gamma$ à l'interface, on étend alors f par continuité dans les domaines Ω^+ et Ω^- , ceci permet de trouver les valeurs fantômes f_i^{g+} et f_{i+1}^{g-} dans chaque domaine.

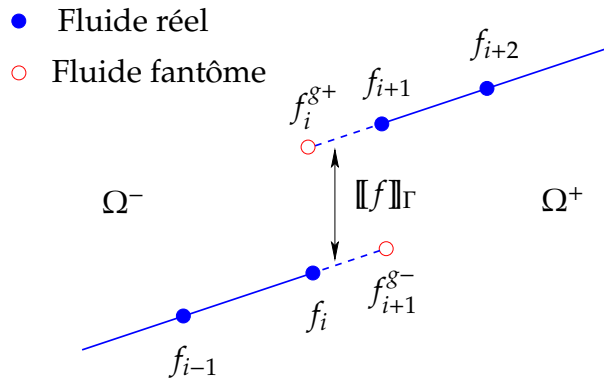


FIGURE 4.10 – Illustration de la méthode ghost fluid dans le cas d'une variable discontinue.

Pour le modèle LES d'atomisation, on va donc vouloir tirer parti de la méthode ghost fluid. En effet, on veut prendre en compte les sauts à l'interface résolue considérée comme étant représentée par la fraction de volume équivalente à 0.5. Néanmoins, son application dans le cadre LES va nécessiter quelques modifications.

Avant toute chose, on appliquera la méthode ghost fluid à une variable discontinue f en 1 dimension afin de bien comprendre les implications de cette méthode.

Application à une variable discontinue. Dans ce paragraphe on souhaite calculer, en monodimensionnel, la dérivée seconde d'une variable f en un point du maillage i en utilisant un schéma centré. On considère la figure 4.10, on remarque donc que f subit un saut à la traversée de l'interface entre i et $i+1$ ($\llbracket f \rrbracket_\Gamma \neq 0$). La dérivée que l'on cherche n'est ainsi pas définie sur l'interface, néanmoins on peut exprimer la dérivée seconde au point i comme suit :

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}|_i = \frac{f_{i+1}^{g^-} - 2f_i + f_{i-1}}{\Delta_x^2} , \quad (4.32)$$

avec $f_{i+1}^{g^-}$ l'extension continue de la variable f dans le domaine Ω^+ . Si l'on connaît la valeur du saut sur tous les points du maillage défini par une fonction $a(x)$ par exemple, on peut alors estimer le saut au niveau de l'interface :

$$\llbracket f \rrbracket_\Gamma = a_\Gamma = \frac{a_{i+1}|\varphi_i| + a_i|\varphi_{i+1}|}{|\varphi_i| + |\varphi_{i+1}|} . \quad (4.33)$$

Ce qui permet d'écrire :

$$f_{i+1}^{g^-} = f_{i+1} + a_\Gamma . \quad (4.34)$$

Au final, on obtient la dérivée voulue en fonction des variables connues :

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}|_i = \frac{f_{i+1} + a_\Gamma - 2f_i + f_{i-1}}{\Delta_x^2} . \quad (4.35)$$

Dans le cas d'une équation de Poisson monodimensionnelle, par exemple, $\partial^2 f / \partial x^2 = g$, sa discrétisation numérique peut se mettre sous la forme matricielle $Af = g$. On fera alors apparaître la valeur du saut dans le second membre :

$$\begin{bmatrix} \ddots & \ddots & 0 & \dots & \dots \\ \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 1/\Delta_x^2 & -2/\Delta_x^2 & 1/\Delta_x^2 & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vdots \\ f_{i-1} \\ f_i \\ f_{i+1} \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vdots \\ \vdots \\ g_i - a_\Gamma/\Delta_x^2 \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (4.36)$$

On peut alors résoudre cette équation avec la méthode de son choix en ajoutant le saut dans le second membre lorsque l'interface liquide/gaz traverse la maille de calcul.

Dérivée discontinue : équation de Poisson La méthode GFM s'applique également aux dérivées discontinues. On va donc ici dériver, en une dimension, un terme de la forme :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\beta \frac{\partial f}{\partial x} \right) , \quad (4.37)$$

sur le point du maillage i . Cette dernière équation est la réduction monodimensionnelle du membre de gauche de l'équation de Poisson 4.27. Considérons la figure 4.11, où l'interface liquide/gaz coupe la maille située entre $i-1$ et i .

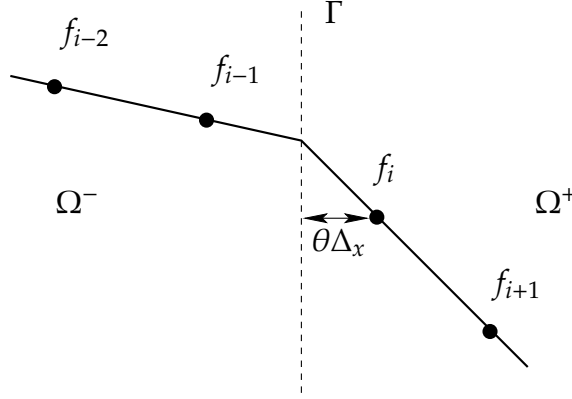


FIGURE 4.11 – Illustration de la méthode ghost fluid dans le cas d'une dérivée discontinue.

Pour l'instant on considère le cas où le coefficient β est clairement défini, $\beta = \beta^+$ dans le domaine Ω^+ et $\beta = \beta^-$ dans Ω^- . Et la fonction f ne subit pas de discontinuité à l'interface $\llbracket f \rrbracket_\Gamma = 0$. De façon générale on écrit 4.37 de manière discrétisée en i comme :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\beta \frac{\partial f}{\partial x} \right) \Big|_i = \left(\beta^+ \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta_x} - \beta^{+,-} \frac{f_i - f_{i-1}}{\Delta_x} \right) / \Delta_x . \quad (4.38)$$

Ici $\beta^{+,-}$ est un coefficient indéterminé dans la mesure où la dérivée première

$$\beta^{+,-} \frac{f_i - f_{i-1}}{\Delta_x} , \quad (4.39)$$

n'est définie que si $\beta^{+,-} = \beta^+$ ou $\beta^{+,-} = \beta^-$. Or la présence de l'interface interdit de prendre une de ces deux solutions. Cependant, il est possible grâce à la fonction level-set de localiser précisément celle-ci. En effet si on définit θ tel que :

$$\theta = \frac{|\varphi_i|}{|\varphi_{i-1}| + |\varphi_i|} , \quad (4.40)$$

alors l'interface coupe la cellule en 2 parties de longueur $(1 - \theta)\Delta_x$ dans Ω^- et $\theta\Delta_x$ dans Ω^+ . Il est alors possible d'estimer la dérivée première 4.39, grâce à une dérivée entièrement située dans Ω^+ :

$$\beta^{+,-} \frac{f_i - f_{i-1}}{\Delta_x} \simeq \beta^+ \frac{f_i - f_\Gamma}{\theta\Delta_x} . \quad (4.41)$$

Il faut alors déterminer f_Γ la valeur de f au niveau de l'interface. Si l'on dispose d'une relation de saut, $\llbracket \beta \partial f / \partial x \rrbracket_\Gamma = b(x)$ alors cela devient possible. Au niveau de l'interface, il vient :

$$\llbracket \beta \frac{\partial f}{\partial x} \rrbracket_\Gamma = \beta^+ \frac{f_i - f_\Gamma}{\theta\Delta_x} - \beta^- \frac{f_\Gamma - f_{i-1}}{(1 - \theta)\Delta_x} = b_\Gamma , \quad (4.42)$$

θ permet d'estimer la valeur du saut à l'interface, avec :

$$b_\Gamma = (1 - \theta)b_i + \theta b_{i-1} . \quad (4.43)$$

La valeur de f_Γ est alors donnée par :

$$f_\Gamma = \frac{\beta^+ f_i(1 - \theta) + \beta^- f_{i-1}\theta - b_\Gamma\theta(1 - \theta)\Delta_x}{\beta^+(1 - \theta) + \beta^- \theta} . \quad (4.44)$$

En considérant cette dernière relation, 4.41 et 4.38, il est possible d'exprimer la dérivée recherchée qui prend en compte les discontinuités à partir de variables connues :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\beta \frac{\partial f}{\partial x} \right) \Big|_i = \left(\frac{\beta^+(f_{i+1} - f_i)}{\Delta_x} - \frac{\beta^*(f_i - f_{i-1})}{\Delta_x} - \frac{\beta^* b_\Gamma(1 - \theta)}{\beta^-} \right) / \Delta_x , \quad (4.45)$$

avec β^* défini comme :

$$\beta^* = \frac{\beta^- \beta^+}{\beta^+ \theta + \beta^- (1 - \theta)} . \quad (4.46)$$

Dans le cas où f subi une discontinuité, $\llbracket f \rrbracket_\Gamma = a_\Gamma$, il faut prendre ce saut en compte, si bien qu'en considérant les remarques faites au paragraphe précédent sur les variables discontinues la relation 4.45 devient :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\beta \frac{\partial f}{\partial x} \right) \Big|_i = \left(\frac{\beta^+(f_{i+1} - f_i - a_\Gamma)}{\Delta_x} - \frac{\beta^*(f_i - f_{i-1})}{\Delta_x} - \frac{\beta^* b_\Gamma(1 - \theta)}{\beta^-} \right) / \Delta_x , \quad (4.47)$$

Au final, cette méthode va donc s'appliquer par exemple lors de la discrétisation de l'équation de Poisson 4.27, où la fonction f équivaut à la pression P et $\beta = 1/\rho$.

Considérations pour le modèle LES Avec le formalisme DNS les valeurs de β^+ et β^- sont clairement identifiées dans la relation 4.47 :

$$\beta^+ = 1/\rho_l \text{ et } \beta^- = 1/\rho_g . \quad (4.48)$$

Pour rappel, le saut des contraintes dans l'équation bilan de quantité de mouvement est donné par la relation 3.45, vu au chapitre précédent, celui-ci peut notamment s'exprimer en relation vectorielle :

$$\llbracket (P\mathbb{1} - \widehat{S}) \cdot \vec{n} \rrbracket_\Gamma = -\sigma\kappa\vec{n} , \quad (4.49)$$

avec $\mathbb{1}$ la matrice identité et $\widehat{S} = \mu(\nabla\vec{u} + \nabla\vec{u}^T)$. Kang *et al* [53] séparent cette condition en 2 sauts, respectivement normal et tangentiel :

$$\llbracket P - \vec{n} \cdot \widehat{S} \cdot \vec{n} \rrbracket_\Gamma = -\sigma\kappa , \quad (4.50)$$

$$\llbracket \vec{t} \cdot \widehat{S} \cdot \vec{n} \rrbracket_\Gamma = 0 . \quad (4.51)$$

En outre, les auteurs montrent que cela permet de d'écrire le saut de pression comme :

$$[[P]]_{\Gamma} = -\sigma\kappa - [[2\mu]]_{\Gamma}(\nabla u \cdot \vec{n}, \nabla v \cdot \vec{n}, \nabla w \cdot \vec{n}) \cdot \vec{n} , \quad (4.52)$$

ainsi que le saut du tenseur visqueux, dont l'établissement particulièrement laborieux et complexe ne sera pas présenté ici. D'un point de vue pratique, le saut du gradient de pression et celui du tenseur visqueux sont alors ajoutés au second membre de l'équation 4.27 lorsque l'interface est détectée au sein d'une maille de calcul.

Pour le modèle LES on souhaite prendre en compte ces sauts à l'interface résolue que nous considérons être située lorsque $\bar{\Phi} = 0.5$. Néanmoins, dans la mesure où les gradients sont lissés par l'opération de filtrage, il est difficile de supposer pour notre modèle que les relations 4.48 s'appliquent directement. Cela peut conduire à surestimer l'impact des sauts à l'interface. La figure 4.12, où l'on a tracé la masse volumique en fonction d'une variable spatiale x , illustre ce fait. Une interface est présente au milieu du domaine. En DNS il est clair que $\rho = \rho_l$ dans le domaine Ω^- et $\rho = \rho_g$ dans Ω^+ . Pour le modèle LES, la masse volumique est répartie par la fraction de volume résolue, tel que :

$$\bar{\rho} = \bar{\Phi}\rho_l + (1 - \bar{\Phi})\rho_g , \quad (4.53)$$

cette dernière relation permet alors de représenter, en sous maille, les inclusions liquides dans le gaz (gouttes) et inversement (correspondant à des bulles dans le liquide). Si bien qu'il est possible, d'avoir $\rho \neq \rho_l$ ou ρ_g proche de l'interface résolue, comme cela est illustré sur la figure 4.12. Dans cette optique cela doit impacter sur la façon dont les 2 phases vont échanger leur quantité de mouvement au niveau de l'interface. Sur la figure 4.12, par exemple, du côté Ω^- un volume de contrôle donné est sensiblement plus « léger » que si il était entièrement rempli de liquide. Il doit donc imposer moins d'inertie à la phase présente dans Ω^+ . *A contrario*, c'est exactement l'inverse dans Ω^+ . Il va donc falloir modifier $[[\bar{\rho}]]_{\Gamma}$ afin de rendre compte de cette modification du rapport d'inertie au niveau de l'interface liquide/gaz résolue.

On décide donc de modifier ce saut en utilisant les valeurs proches interface, c'est-à-dire situées dans la maille de calcul traversée par l'interface résolue. Si on considère une fois de plus le cas de la figure 4.11 où l'interface traverse la cellule située entre $i-1$ et i , 2 cas se présentent alors :

Si $\varphi_i > 0$ et $\varphi_{i-1} < 0$: On définit le saut de masse volumique comme :

$$[[\bar{\rho}]]_{\Gamma} = \bar{\rho}_{i-1} - \bar{\rho}_i . \quad (4.54)$$

Si $\varphi_i < 0$ et $\varphi_{i-1} > 0$: Le saut est inversé par rapport au cas précédent :

$$[[\bar{\rho}]]_{\Gamma} = \bar{\rho}_i - \bar{\rho}_{i-1} . \quad (4.55)$$

Ce qui en pratique conduit à utiliser dans la relation 4.47 appliquée au saut du gradient de pression :

$$\beta^+ = 1/\bar{\rho}_i , \quad (4.56)$$

$$\beta^- = 1/\bar{\rho}_{i-1} . \quad (4.57)$$

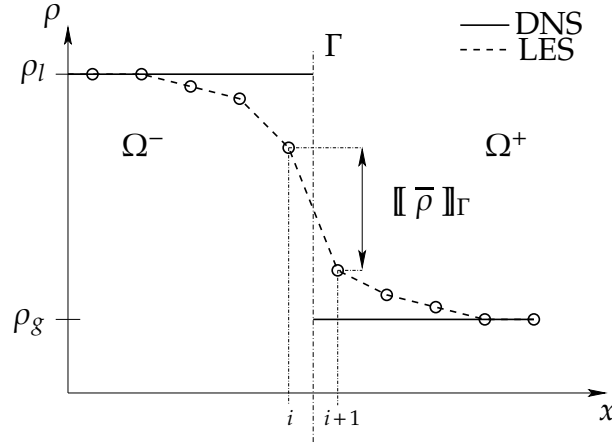


FIGURE 4.12 – Comparaison des sauts de masse volumique au passage de l’interface Ω , dans le cadre DNS (ligne pleine) et pour le modèle (ligne tiret).

Ceci est consistant avec l’idée du modèle qui impose que lorsque l’interface est bien résolue par le maillage, alors celui-ci doit tendre vers une résolution de l’interface de type DNS. En effet, dans ce cas alors le saut de masse volumique doit tendre vers celui obtenu dans un cas où les phases sont clairement identifiées de chaque côté de l’interface liquide gaz, $[\bar{\rho}]_{\Gamma} \approx \rho_g - \rho_l$. Ainsi, dans le cas d’une interface résolue on s’assure de prendre en compte le bon saut.

Les remarques faites dans ce paragraphe sont aussi valable pour μ la viscosité dynamique. Notamment pour prendre en compte le saut du tenseur visqueux. Elle sera donc modifiée de la même façon que ρ pour la prise en compte des sauts à l’interface.

4.3.2.3 Algorithme de redistance

Pour le modèle, on propose de prendre en compte les sauts et la force de tension de surface, au niveau de l’interface liquide/gaz, que l’on considère être représentée par l’iso- $\bar{\Phi} = 0.5$. Néanmoins, cela requiert de bien repérer l’interface résolue. Il est possible de tirer parti de la fonction Level-Set φ , notamment pour la méthode ghost fluid. Dans cette optique il faut maintenir le niveau 0 de la fonction level-set sur l’iso-0.5 de $\bar{\Phi}$ tout en s’assurant de garder une fonction distance valide. En effet, pour la méthode GFM, l’équation 4.40 requiert que la fonction level-set doit donner la distance algébrique à l’interface en tout point du maillage, en plus de représenter l’interface par son niveau 0. C’est-à-dire que l’on cherche à obtenir, et à maintenir φ sur l’interface Γ tel que :

$$\begin{cases} \Gamma = \{\vec{x} | \varphi(\vec{x}, t) = 0\} , \\ |\nabla \varphi| = 1 . \end{cases} \quad (4.58)$$

Or, dans le cadre des simulations liquides/gaz, utilisant la fonction level-set comme méthode de suivi d’interface, la condition 4.58 n’est pas conservée directement par les schémas numériques. Si on considère l’équation de transport de φ dans ce cadre :

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial U_i \varphi}{\partial x_i} = 0 , \quad (4.59)$$

la fonction φ proche du niveau 0 peut être considérablement étirée ou distordue par le champ de vitesse, surtout dans le cas d'écoulements fortement cisailés. Après quelques itérations, le champ de φ perd sa propriété de fonction distance et $|\nabla\varphi| \neq 1$. Ainsi, il devient nécessaire de reinitialiser la fonction φ entre chaque pas de temps de l'équation 4.59 afin de s'assurer que φ reste une fonction distance représentative de l'interface. Pour ce faire, on peut utiliser un algorithme qui permet de recalculer entre chaque pas de temps une fonction distance algébrique et donc de réorganiser les lignes de niveaux autour de celle de niveaux 0.

Afin d'imposer $|\nabla\varphi| = 1$, Sussman *et al* [124] proposent d'utiliser un algorithme dit de redistance, ou de reinitialisation :

$$\frac{\partial d}{\partial \tau} = \text{sign}(\varphi)(1 - |\nabla d|) , \quad (4.60)$$

où $\text{sign}(\varphi)$ est le signe de φ et τ un temps fictif. Partant d'une fonction φ , l'équation 4.60 permet de trouver une fonction distance d représentative du niveau 0 à l'équilibre lorsque $\partial d / \partial \tau = 0$. Au temps final, τ_{final} , $|\nabla d| = 1$. Il est important de noter que cet algorithme conserve le niveau 0 de la fonction φ . Cela signifie que l'interface n'est pas affectée par cette opération. Au final, la variable d représente bien l'interface et a la propriété de fonction distance algébrique recherchée. On peut alors réinitialiser la fonction level-set dans tout le domaine :

$$\varphi = d(\tau = \tau_{final}) . \quad (4.61)$$

Dans sa thèse, Tanguy [125] teste cet algorithme sur différents cas :

- Le cercle fendu de Zalesak.
- le cas du serpent.

Formellement la fonction sign n'est pas utilisée telle quelle, un lissage de celle-ci est nécessaire :

$$\text{sign}(\varphi) = \begin{cases} -1 & \varphi < -dx , \\ \frac{\varphi}{\sqrt{\varphi^2 + dx^2}} & |\varphi| \leq dx , \\ 1 & \varphi > dx . \end{cases} \quad (4.62)$$

L'auteur préconise l'utilisation d'un schéma Runge-Kutta d'ordre 2 ou 3 pour la discrétisation en temps et un schéma WENO5 en espace. L'application d'une version modifiée de cet algorithme de réinitialisation va nous permettre d'obtenir une fonction distance φ représentative de l'iso- $\overline{\Phi} = 0.5$.

Modification de l'algorithme de réinitialisation dans le cadre du modèle LES Pour le modèle LES on ne résout pas explicitement l'équation de transport de la Level-set φ , 4.59. Néanmoins, on souhaite utiliser φ afin de prendre en compte les discontinuités ainsi que la force de tension de surface à l'interface résolue.

En effet, il est possible d'obtenir une fonction distance φ représentative de l'interface résolue, en modifiant la valeur de la fonction initiale que l'on entre dans l'algorithme de réinitialisation. Ainsi, après avoir résolu l'équation de transport de la fraction de volume $\overline{\Phi}$, on définit :

$$\varphi_{init} = (\bar{\Phi} - \frac{1}{2})\Delta_x . \quad (4.63)$$

Cette dernière formulation permet d'obtenir φ_{init} représentant bien initialement l'interface résolue, en effet il vient :

$$\begin{cases} \varphi_{init} < 0 \text{ si } \bar{\Phi} < 0.5 . \\ \varphi_{init} > 0 \text{ si } \bar{\Phi} > 0.5 . \end{cases} \quad (4.64)$$

On résout alors l'équation 4.60 avec φ_{init} comme valeur initiale. Si bien que la fonction level-Set que l'on obtient lorsque, $\partial\varphi/\partial\tau = 0$ correspond alors à l'iso- $\bar{\Phi} = 0.5$ avec $|\nabla\varphi| = 1$. La présence de Δ_x comme facteur multiplicateur dans la relation 4.63 assure que la valeur initiale de φ_{init} ne soit pas trop éloignée de la valeur finale recherchée. Ceci a pour effet, en outre, d'accélérer le processus de réinitialisation.

Exemple de redistance à partir d'un champ de fraction de volume À des fins de validation de l'algorithme de redistance, il est possible de réaliser un simple test. Ce test consiste à partir d'un champ de fraction de volume $\bar{\Phi}$ et résoudre l'équation 4.60 en prenant comme valeur initiale φ_{init} . On part d'une sphère de rayon R , de telle sorte que la ligne de niveau $\bar{\Phi} = 0.5$ se situe en R . On peut voir cette ligne sur la figure 4.13(a) en noir.

Les conditions sont les suivantes :

- $L_x = L_y = L_z = 100$ (unité de longueur fictive)
- $R = \frac{L_x}{4}$
- Maillage $100 \times 100 \times 100$
- Pas de temps $d\tau = \frac{\Delta_x}{2}$

Les autres lignes doivent s'organiser autour de l'interface résolue $\bar{\Phi} = 0.5$ avec $|\nabla\varphi| = 1$. La figure 4.13 présente la répartition des lignes de niveaux en fonction de différents temps τ fictifs. On voit clairement que les lignes de niveaux se créent autour de l'interface résolue $\bar{\Phi} = 0.5$ symbolisée en noir. Le champ de fonction distance est bien retrouvé au bout de 50 itérations, les lignes de niveaux sont alors représentatives de l'interface résolue avec $|\nabla\varphi| = 1$.

La figure 4.14 présente une visualisation tridimensionnelle de la fonction distance φ reconstruite à partir de la fraction de volume résolue $\bar{\Phi} = 0.5$.

On dispose donc d'un algorithme capable de redistancer à partir d'un champ de fraction de volume initial. En pratique, au sein une simulation, quelques pas de redistance suffisent. Les propriétés de distance à l'interface ainsi que $|\nabla\varphi| = 1$ ne sont importantes qu'autour de l'interface là où les sauts physiques interviennent. Dans sa configuration DNS le code ARCHER nécessite seulement 3 pas de redistance comme montré dans le manuscrit de thèse de Ménard [90]. Ce sera également le cas pour le modèle LES.

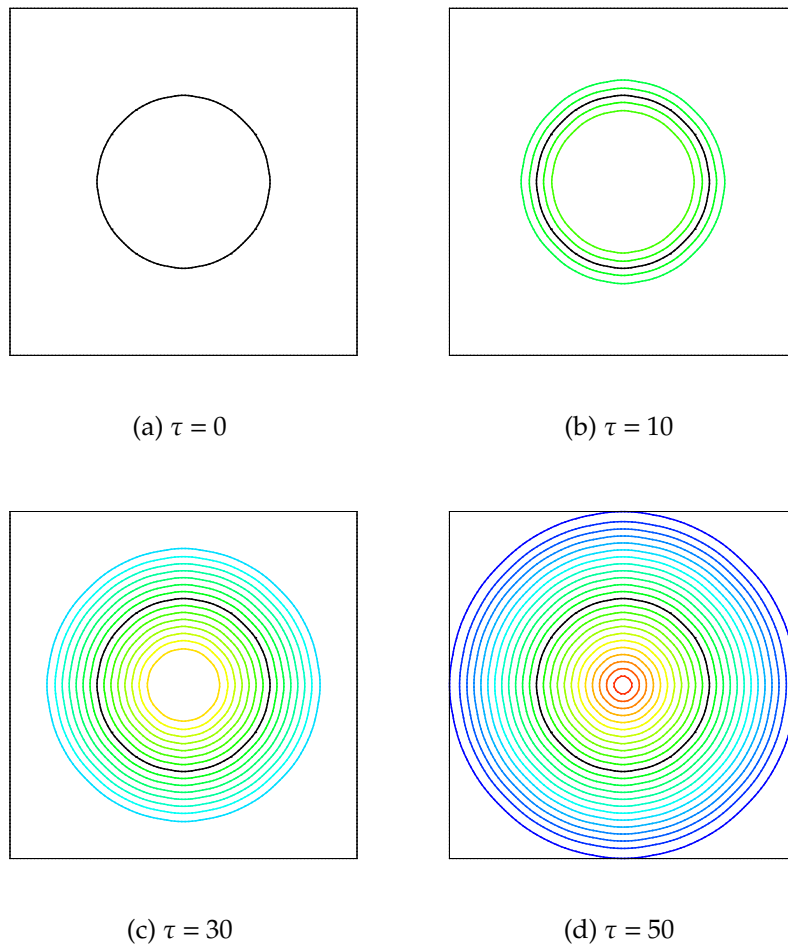


FIGURE 4.13 – Résultats à différents temps τ de l'algorithme de redistance, traits gras noir : $\text{iso-}\Phi = 0.5$. Fins couleurs : lignes de niveaux de φ .

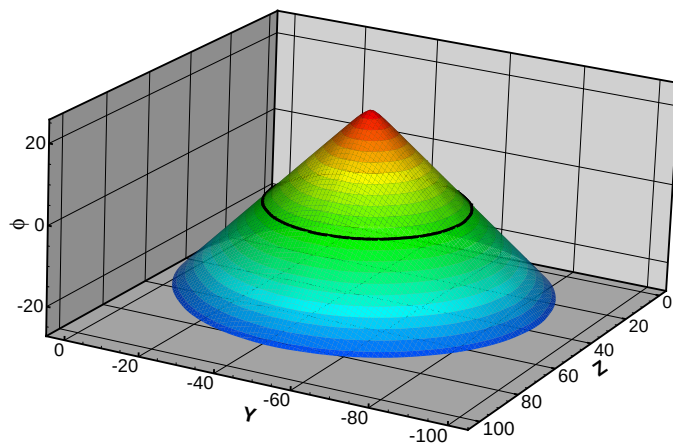


FIGURE 4.14 – Visualisation 3D de la fonction distance. Résultat final de l'algorithme de redistance autour de l' $\text{iso-}\Phi = 0.5$: trait noir.

4.3.2.4 Calcul de la courbure

Dès lors que l'on dispose d'une fonction distance à l'interface valide, il est possible de calculer les propriétés géométriques de l'interface résolue, à savoir sa normale $\vec{n}$ et sa courbure résolue $\bar{\kappa}$:

$$\begin{cases} \vec{n} = \nabla\varphi/|\nabla\varphi| , \\ \bar{\kappa} = -\nabla \cdot \vec{n} . \end{cases} \quad (4.65)$$

La méthode de Brackbill *et al* [13] est utilisée afin de calculer la courbure, $\bar{\kappa}$. La force de tension de surface résolue $\vec{F}_{tension}$ est donc calculée sur tout le maillage LES de la façon suivante :

$$\vec{F}_{tension} = \sigma \bar{\kappa} \vec{n} \delta_{\Gamma} . \quad (4.66)$$

Néanmoins, elle n'est prise en compte qu'au niveau de l'interface résolue à travers le saut de pression. C'est à dire au niveau de $\varphi = 0$ qui correspond à l'iso- $\Phi = 0.5$ grâce à la modification de l'algorithme de redistance, détaillée dans la section précédente.

4.3.2.5 Profil en sortie de buse et injection de turbulence

Une des difficultés dans tous les types de simulations de jet d'atomisation (*e.g.* DNS ou LES) concerne la condition limite d'injection, c'est-à-dire à la sortie de l'injecteur. Cette condition limite conditionne de façon significative le comportement du jet en aval. Le but est de déstabiliser le jet initial. Il existe plusieurs solutions afin de rendre compte des fluctuations de vitesse à l'injection. La première, et la plus simple, est d'ajouter des fluctuations de vitesse aléatoires sur le profil d'entrée. Auquel cas on ignore les corrélations de vitesse au sein de l'écoulement, ce qui conduit à ignorer les grandes échelles de la turbulence, ce à quoi est sensible la LES. Il est également possible d'utiliser des calculs menés au sein de la buse d'injection, cette solution est attractive et très intéressante mais néanmoins souvent complexe à mettre en œuvre.

Une dernière solution consiste à générer des fluctuations de vitesse sur le profil d'entrée, de sorte que celles-ci soit corrélées en temps et en espace, au sens de la turbulence. Le solveur ARCHER utilise une méthode développée par Klein *et al* [56] permettant de trouver un vecteur $\vec{u}'$ de variables aléatoires corrélées telles que $\overline{u'_i u'_j} = R_{ij}$, où R_{ij} est le tenseur des corrélations. Ici, $\overline{(\bullet)}$ désigne un opérateur de moyenne spatial ou encore temporel. Il convient tout de même de s'imposer la forme de R_{ij} . On écrit alors la vitesse instantanée, u_i , dans la direction i :

$$u_i = \mathcal{U}_i + u'_i , \quad (4.67)$$

avec $\mathcal{U}_i$ le profil d'entrée moyen.

On résume très brièvement la méthode. Klein *et al* [56] proposent d'exprimer la variable quelconque y grâce à une série de variables aléatoires h_m , possédant les propriétés suivantes : $\bar{h}_m = 0$ et $\overline{h_m h_n} = \delta_{mn}$. En monodimensionnelle, y s'exprime au point m :

$$y_m = \sum_{n=-N}^N b_n h_{m+n} . \quad (4.68)$$

Cette dernière expression est, en fait, la forme numérique d'une opération de convolution. On cherche alors les coefficients b_n du filtre capables de rendre compte de la fonction d'auto-corrélation de la variable y . Klein *et al* [56] proposent, à ce point, d'utiliser un coefficient d'auto-corrélation adimensionné défini par Batchelor [4], $R_{yy}(d) = \exp(-\pi d^2/4L^2)$, avec d une distance et L une longueur caractéristique de turbulence. Considérant que $\overline{h_m h_n} = \delta_{mn}$, l'auto-corrélation de y peut s'écrire uniquement en fonction du filtre b , de manière discrétisée :

$$\frac{\overline{y_m y_{m+k}}}{\overline{y_m y_m}} = \frac{\sum_{j=-N+k}^N b_j b_{j-k}}{\sum_{j=-N}^N b_j^2} = \exp\left(\frac{-\pi k^2}{4n^2}\right), \quad \text{avec } L = n_x \Delta_x . \quad (4.69)$$

Les auteurs proposent ainsi un filtre permettant de retrouver ce dernier résultat :

$$b_i \simeq \frac{\tilde{b}_i}{\sum_{j=-N}^N \tilde{b}_j^2}, \quad \text{avec } \tilde{b}_i = \exp\left(\frac{-\pi i^2}{2n^2}\right) . \quad (4.70)$$

On applique donc cette méthode afin de trouver u'_i . L'extension en tridimensionnelle de cette méthode peut se faire si l'on considère que le filtre peut s'exprimer, $b_{ijk} = b_i b_j b_k$. Avec la relation 4.68, on obtient alors autant de variables indépendantes que voulues mais néanmoins chacune est corrélée dans les 3 directions i, j, k . Dans la mesure où l'injection est un plan bidimensionnel de champ de vitesse, les 2 premières directions sont spatiales et la troisième est alors temporelle. On choisit, pour chaque direction spatiale, une longueur caractéristique, $L_x = n_x \Delta_x$, $L_y = n_y \Delta_y$ ainsi qu'une échelle de temps dans la troisième direction $L_t = n_t \Delta_t$.

A l'injection, le profil de sortie de la vitesse est donné par la formule empirique [113] :

$$\frac{U(r)}{U_{max}} = \left(1 - \frac{r}{R}\right)^{1/n}, \quad (4.71)$$

avec U_{max} la vitesse maximale, R le rayon du jet, r la distance radiale à l'axe et n un paramètre dépendant du nombre de Reynolds. A cette vitesse, des fluctuations u' corrélées en temps et en espace sont alors ajoutées.

La figure 4.15(a) présente un champ instantané d'énergie cinétique normalisé à la sortie de l'injecteur. On peut voir que l'injection n'est pas uniforme, ceci étant due à l'ajout des fluctuations de vitesse u' . Ce que l'on peut également observer sur la figure 4.15(b) où l'on a tracé le profil de l'énergie cinétique normalisée selon x .

Il est important de noter que l'opération de filtrage 4.68 sert uniquement à obtenir des fluctuations de vitesse corrélées. Cependant pour la LES, il convient de bien choisir la longueur de corrélation L , de sorte que celle-ci puisse être décrite par le maillage. En effet, dans le cas contraire, les fluctuations seraient alors équivalentes à un bruit blanc. Ceci implique qu'il faut disposer dans l'injecteur de suffisamment de mailles afin de

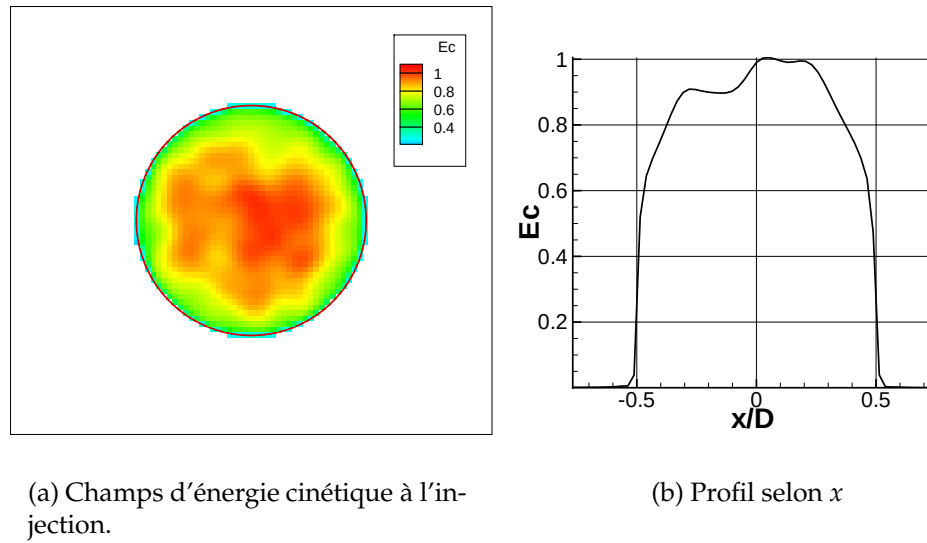


FIGURE 4.15 – Energie cinétique adimensionnée à la sortie de l'injecteur.

décrire les premiers tourbillons à l'injection qui vont conduire à la déstabilisation du jet. La taille du filtre LES, $\bar{\Delta}$, doit donc être plus petite que l'échelle, L des tourbillons résolus : $\bar{\Delta} < L$.

4.3.3 Conclusions sur les modifications apportées au solveur Navier-Stokes

Au final, un certain nombre de modifications ont été apportées afin de pouvoir résoudre les équations de transport fixées par le modèle LES d'atomisation. La majeure partie de ces modifications concerne, en réalité, la prise en compte de l'interface, qui est une des principales difficultés dans le contexte LES des écoulements liquides/gaz. On notera donc la prise en compte des termes de sous maille dans la résolution des équations de Navier-Stokes filtrées, l'utilisation de l'algorithme de reinitialisation afin de repérer l'interface résolue, et notamment obtenir une fonction Level-set équivalente à une fonction distance algébrique. Enfin, la modification des sauts de gradient de pression et du tenseur visqueux permet de prendre en comptes les discontinuités à l'interface, grâce à la méthode GFM quand la résolution LES permet de capturer l'interface.

En terme de développement, il reste un dernier point qui concerne la description des structures de sous maille. La densité d'interface liquide/gaz va permettre d'obtenir des informations sur le comportement du spray dans la zone diluée. Ce point va nécessiter d'intégrer au solveur une nouvelle équation de transport, qui n'était pas présente dans le solveur ARCHER. On présente donc dans la suite l'établissement de cette équation de transport pour la densité d'interface liquide/gaz.

4.4 Equation de transport de la densité d'interface liquide/gaz

Comme cela a été souligné plusieurs fois dans ce mémoire, il est difficile de raisonner en terme de gouttes sphériques surtout dans la zone dense où tout une zoologie de forme et de taille de structures liquides est présente. De plus, dans le cas de la LES beaucoup de ces structures ont une dimension inférieure à la taille du filtre $\bar{\Delta}$. Pour s'en convaincre et illustrer les précédents propos, il est possible de réaliser un simple test à partir des données DNS d'atomisation :

Sur la figure 4.16, sont tracées l'iso- $\Phi = 0.5$ et l'iso- $\bar{\Phi} = 0.5$ avec $\bar{\Delta} = 9\Delta_x^{DNS}$ (avec Δ_x^{DNS} la taille de la maille DNS). Partant d'un champ de fraction de volume Φ , on applique une opération de filtrage. En premier lieu, on remarque que le filtrage étale ces structures et par conséquent il y a une perte d'information sur leur topologie. C'est-à-dire que l'iso 0.5 de fraction de volume filtrée n'est plus à même de fournir une description topologique suffisante. On remarque également que ces structures qui, en quelque sorte « disparaissent », de la vision résolue ne sont, pour la plupart, pas sphériques.

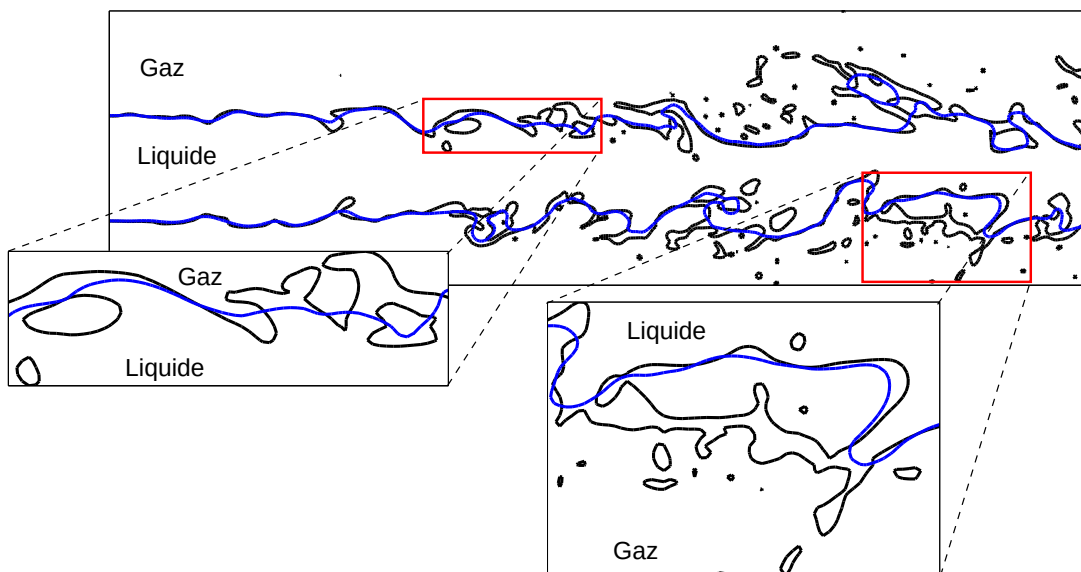


FIGURE 4.16 – Isocontour de $\Phi = 0.5$ (Ligne noire) et $\bar{\Phi} = 0.5$ (ligne bleue) avec $\bar{\Delta} = 9\delta_x$. La simple application du filtre sur le champs de fraction de volume issu de la DNS montre que les structures ayant une taille inférieure à $\bar{\Delta}$ sont lissées et donc ne sont plus décrites par les grandes échelles. Comme on peut le voir sur les zooms réalisés (rectangles rouges) une grande majorité ces structures de sous maille ne sont pas du tout sphériques.

La notion de diamètre ne pouvant être utilisée, la densité d'interface sera introduite pour caractériser la quantité d'interface présente dans un volume de contrôle. Et donc offre une meilleure description topologique de l'écoulement liquide/gaz.

Reliée à la notion d'aire interfaciale introduite par Ishii [48] en 1975, il est possible

de dériver de plusieurs manières l'équation de transport de la densité d'interface. Outre les termes temporel et convectif classiques, cette équation doit contenir des termes qui rendent compte des phénomènes physiques en présence lors du processus d'atomisation, comme le break-up ou le phénomène de coalescence, par exemple.

4.4.1 Définitions et généralités.

Par définition, la densité d'interface s'écrit comme le rapport entre l'aire interfaciale comprise dans un volume de contrôle et le volume de celui-ci :

$$\text{Densité interfaciale} = \frac{\text{Aire interfaciale}}{\text{Volume de contrôle}} . \quad (4.72)$$

La figure 4.17 (a) présente une vue schématisée de la situation. L'aire interfaciale est donnée par la surface d'interface (en bleu) des structures liquides comprises dans le volume de contrôle Ω (rectangle rouge).

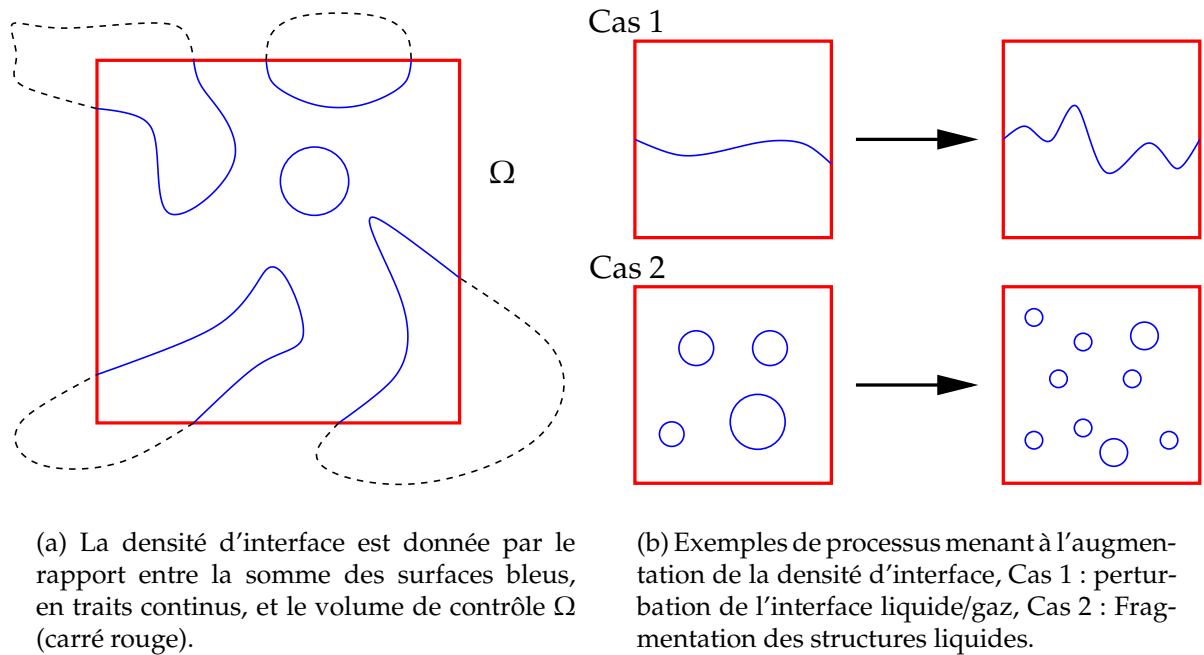


FIGURE 4.17 – Schéma explicatif de la densité d'air interfaciale (a).

Delhaye [25] donne une définition mathématique de la quantité d'interface locale, Σ , comme étant une mesure de l'interface dans un volume fermé :

$$\bar{\Sigma} = \frac{1}{V} \oint_{\text{Volume}} \delta_s dv , \quad (4.73)$$

où δ_s est une fonction delta de Dirac centrée sur l'interface. On comprend dès lors que, pour un volume de liquide donné, l'augmentation de la densité d'interface doit correspondre à une interface plus perturbée ou encore à des gouttes ou des structures liquides qui se sont fragmentées (figure 4.17 (b), cas 1 et 2).

L'avantage de la densité d'interface dans le cas de l'atomisation liquide/gaz est de s'affranchir de la description du spray en terme de gouttes sphériques, c'est d'ailleurs ce qui motive son utilisation ici. Néanmoins, il est toujours possible de raccorder Σ avec cette vision. A titre d'exemple, si l'on fait l'hypothèse que les gouttes sont sphériques avec une distribution mono-disperse au sein du volume de contrôle, on peut alors obtenir le diamètre moyen de Sauter avec :

$$D_{32} = \frac{6\bar{\Phi}}{\bar{\Sigma}} , \quad (4.74)$$

ou encore la densité volumique de gouttes, notée N :

$$N = \frac{6\bar{\Phi}}{\pi D_{32}^3} . \quad (4.75)$$

La notion de densité d'interface est bien adaptée à la simulation aux grandes échelles dans la mesure où le volume de contrôle est clairement identifié, il s'agit du volume du noyau de convolution. Celui-ci étant de l'ordre de $\bar{\Delta}^3$, on définira alors en LES la densité d'interface $\bar{\Sigma}$ comme :

$$\bar{\Sigma} = \frac{\text{Surface dans le filtre}}{\text{Volume du filtre}} \simeq \frac{S_f}{\bar{\Delta}_x \bar{\Delta}_y \bar{\Delta}_z} . \quad (4.76)$$

4.4.2 Origine et construction de l'équation de transport de la densité d'interface liquide/gaz

Afin d'obtenir une équation de transport moyenne, l'idée est de partir une équation de transport locale de l'aire interfaciale, représentant la limite liquide/gaz, que l'on intègre ensuite sur le volume de contrôle V . Après intégration, l'équation de transport moyenne contient alors des termes sources ou puits qui doivent rendre compte des mécanismes de production et de destruction de l'interface au sein du volume de contrôle, tels que la vaporisation ou encore le breakup-coalescence dans le cas de l'atomisation.

La dérivation d'une équation de transport pour la densité d'interface liquide/gaz de sous maille n'est pas encore clairement établi. Néanmoins, une revue de la littérature concernant la densité d'interface liquide/gaz fait ressortir 3 pistes :

- I. On peut s'intéresser directement à l'équation de transport de la quantité d'interface locale et faire apparaître les termes à modéliser après intégration sur un volume de contrôle V . Cette approche est délicate dans la mesure où l'aire interfaciale est définie grâce à une fonction de Dirac centrée sur l'interface. Il faut donc travailler au sens des fonctions généralisées. Néanmoins, il est possible d'obtenir une équation de transport de la densité d'interface moyenne. La difficulté réside alors dans l'identification des termes non fermés avec les phénomènes physiques associés. Ce travail, notamment exploré par Delhay *et al* [94, 25], n'est pas encore abouti. En 2007, Morel [93] propose une revue de cette approche.

- II. Une approche consiste à résonner en terme de gouttes liquides. En effet, s'il est possible de s'appuyer, par exemple, sur une équation pour la PDF des diamètres de gouttes alors on peut obtenir une équation exacte pour la densité d'interface en intégrant tous les diamètres de cette PDF multiplié par la surface des gouttes, $4\pi D^2$. Un effort de modélisation est néanmoins requis car des termes non fermés apparaissent du fait de l'intégration. Cette méthode est en fait une extension de l'approche Lagrangienne, dans la mesure où la sphéricité des gouttes est supposée. La présente approche est donc limitée aux sprays dispersés pour lesquels il est possible d'écrire une équation pour la PDF des diamètres. Le lecteur pourra trouver des exemples de cette approche dans les travaux de Iyer *et al* [49, 50, 57]
- III. Enfin, il existe une troisième approche, plus phénoménologique, basée sur les modélisations existantes d'aire interfaciale dans le cas d'écoulements gazeux turbulents. En effet, dans cadre des écoulements réactifs, il a été développé le concept de surface de flamme [85] (représentant la limite gaz brûlés/frais) ainsi que l'équation de transport de sa densité moyenne. Une analogie entre l'équation de transport de surface de flamme et celle de l'interface liquide/gaz peut alors être envisagée. Initialement, cette approche a été proposée par Vallet *et al* [129, 130]. Avec cette méthode l'équation de transport est postulée et différents termes doivent être ajoutés afin de représenter les phénomènes physiques impactant l'évolution de la quantité de surface. De fait, on obtient une équation directement modélisée. Cependant, cette méthode est soumise à validation, d'autant plus qu'il existe une grande variété de versions suivant les auteurs [12, 66, 7, 51, 8, 116]. Il faut choisir avec précaution quels sont les termes prépondérants selon le type d'écoulement.

Au final, il est important de noter que, dans l'idéal, les 3 approches devraient se rejoindre, notamment dans leurs comportements aux limites. Entre autres exemples, pour les approches II et III, les formulations se doivent d'être compatibles dans le cas d'un spray dispersé. Dans ce contexte, seule la méthode I pourrait, à terme, statuer de façon définitive sur la validité des 2 autres méthodes.

4.4.2.1 Équation de transport de la densité de surface de flamme

Cette section explique brièvement le cheminement qui conduit à l'écriture l'équation de transport de la densité d'interface liquide/gaz en utilisant l'approche III.

Le concept de surface de flamme a été introduit initialement par Marble *et al* [85]. Elle caractérise la zone entre les réactifs frais et brûlés, là où les transferts de masse, de quantité de mouvement et d'énergie ont lieu. Les auteurs introduisent alors une équation de transport empirique de la densité de surface de flamme. En se basant sur le formalisme de Pope [100] sur le transport d'aire interfacial, Candel *et al* [16] obtiennent, de façon plus rigoureuse, une équation exacte de transport de la densité de surface de flamme :

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \frac{\partial (U_i \Sigma)}{\partial x_i} = \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_i} - n_i n_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \right) \Sigma, \quad (4.77)$$

avec $\vec{U}$ la somme de la vitesse du fluide environnant et de la vitesse de propagation de

la flamme, S_L , dans la direction normale, $\vec{U} = \vec{u} + S_L \vec{n}$, $\vec{n}$ étant la normale unitaire à la surface de flamme.

Basé sur le constat que, bien qu'étant un outil précieux à des fins de validation, l'utilisation de l'équation 4.77 reste difficile à utiliser, Duclos *et al* [28] proposent une équation de transport de la densité de surface de flamme moyenne avec une approche phénoménologique :

$$\frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u}_i \bar{\Sigma})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\nu_t}{Sc_t} \frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial x_i} \right) + S_1 + S_2 + S_3 - D . \quad (4.78)$$

Hormis les termes classiques de variation temporelle et d'advection dans le membre de gauche, l'équation 4.78 présente, dans celui de droite, des termes sources relatifs aux phénomènes physiques influençant la surface de flamme. Ceux-ci réclament quelques explications, dans le cas des flammes donc :

- $\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\nu_t}{Sc_t} \frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial x_i} \right)$ correspond à la diffusion turbulente, ici modélisée par une loi du type gradient,
- S_1 correspond à l'étirement par le champ moyen de vitesse,
- S_2 à l'étirement induit par les mouvements turbulents,
- S_3 peut être interprété comme un terme source induit par le gradient de fraction massique de fuel. Il est non nul même si $\Sigma = 0$, et joue en fait le rôle d'un terme d'initialisation dans les couches de cisaillement,
- enfin D caractérise l'effet de la réaction de combustion elle-même, la surface de flamme se réduisant à mesure que les réactifs réagissent ou par interaction entre plusieurs fronts de flamme.

Les phénomènes physiques à l'œuvre permettent alors d'envisager une analogie entre l'équation de transport de surface de flamme et celle de l'interface liquide/gaz. En effet, les mécanismes comme l'étirement moyen et turbulent ou encore la diffusion turbulente sont similaires aussi bien au niveau de la surface de flamme qu'au niveau de l'interface liquide/gaz. Néanmoins, il convient de préciser ici que les mécanismes menant à la production ou à la destruction de densité d'interface diffèrent tout de même dans les 2 cas. Dans le cas d'un écoulement réactif la densité de surface de flamme est principalement influencée par l'avancement de la réaction et la diffusion des espèces. Alors que dans le cas d'un écoulement liquide/gaz, la tension de surface et les discontinuités de masse volumiques jouent un rôle prépondérant sur l'évolution de la densité d'interface liquide/gaz.

4.4.2.2 Modèle de Vallet *et al* [129, 130]

Vallet *et al* [130, 129] postulent une formulation de l'équation de transport de la densité moyenne d'interface liquide/gaz dans le cas de l'atomisation. Cette formulation a été proposée initialement pour le modèle ELSA (modèle Euler - Lagrange pour les Sprays et l'Atomisation) avec le formalisme RANS. Ceci dans le cadre d'écoulements à hauts nombres de Weber et Reynolds. A l'instar de la densité de surface de flamme,

les auteurs présumant que cette équation de transport doit contenir un terme de diffusion, car l'interface est dispersée par la turbulence, et des termes de destruction afin de prendre en compte les phénomènes physiques responsables de l'étirement et la coalescence de celle-ci. Ils écrivent alors :

$$\frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{u}_i \bar{\Sigma}}{\partial x_i} = \frac{\partial \left[D_s \left(\frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial x_i} \right) \right]}{\partial x_i} + (A - a) \bar{\Sigma} - V_s \bar{\Sigma}^2, \quad (4.79)$$

où D_s est un coefficient de diffusion approprié, $1/A$ et $1/a$ sont 2 échelles de temps relatives à la production et V_s est un coefficient ayant la dimension d'une vitesse ($m.s^{-1}$) :

- A est lié à l'étirement à travers le gradient moyen de la vitesse, il traduit l'action grandes échelles,
- a à l'étirement dû à la turbulence, il est proportionnel à l'inverse d'un temps turbulent,
- le troisième terme du membre de droite est un terme de destruction, les auteurs considèrent qu'il est principalement dû au phénomène de coalescence. Ce phénomène résulte de l'interaction de 2 interfaces proches, ceci explique sa dépendance au carré de $\bar{\Sigma}$.

L'étirement moyen est modélisé par une loi de type gradient :

$$A = v_{t_j}^* \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}, \quad (4.80)$$

$v_{t_j}^*$ est modélisé grâce au tenseur de Reynolds de façon classique dans le formalisme RANS. Ceci garantit, entre autre, l'augmentation de la densité d'interface en présence de turbulence ainsi que de forts gradients de vitesse.

Étant attendu que la turbulence plisse l'interface, les auteurs estiment que a^{-1} doit être proportionnel à un temps turbulent τ_t :

$$a = \frac{\alpha_1}{\tau_t}. \quad (4.81)$$

Considérant que le phénomène de rupture par collision comme prépondérant et utilisant un temps caractéristique de rupture des gouttes, a est alors modélisé par :

$$a = a_{coll} = \frac{\alpha_2}{(36\pi)^{2/9}} (l_t \bar{\Sigma})^{2/3} \left(\frac{\rho_l}{\rho \tilde{\Phi}} \right)^{4/9} \frac{1}{\tau_t}, \quad (4.82)$$

l_t est une longueur caractéristique de turbulence, $\tilde{\Phi}$ est la fraction massique du liquide et α_2 une constante de l'ordre de l'unité. Afin de modéliser V_s dans 4.79, les auteurs considèrent que loin du nez de l'injecteur il existe un équilibre entre les phénomènes de coalescence et de rupture, ce qui permet d'écrire la relation suivante :

$$a \bar{\Sigma}_{eq} = V_s \bar{\Sigma}_{eq}^2. \quad (4.83)$$

Il vient alors l'expression suivante pour le terme caractéristique V_s :

$$V_s = \frac{a_{coll}\rho_l D_{crit}}{6\bar{\rho}\Phi} , \quad (4.84)$$

où D_{crit} est un diamètre d'équilibre. Ce diamètre, autrement appelé critique, est en fait relié à la notion de Weber critique, We_{crit} . En effet, si on fait l'hypothèse que l'on tend vers un état stable lorsque localement les forces d'inerties sont compensées par les forces de tension de surfaces, le nombre de Weber local devrait tendre vers une valeur constante. Il est pris par Vallet *et al* [129, 130] de ordre de l'unité :

$$We_{crit} = \rho_g \frac{v_r^2 D_{crit}}{2\sigma} \simeq 1 . \quad (4.85)$$

Cette relation exprime le fait que pour une énergie cinétique turbulente donnée, il doit exister un rayon d'équilibre, $r_{eq}(= D_{crit}/2)$, vers lequel les gouttes ont tendance à tendre, simplement du fait que les ruptures et les coalescences se compensent. Ce rayon d'équilibre doit être considéré au sens d'un rayon moyen, des fluctuations de la taille des gouttes sont toujours présentes. Les auteurs insistent sur le fait que cet équilibre doit mettre un certain temps à s'établir, ne serait-ce par exemple, du fait de la plus grande inertie de la phase liquide. En outre, il est difficile de postuler cet équilibre dès la sortie de l'injecteur. Cet équilibre doit être atteint seulement après un temps de « relaxation ».

Au final, il convient de souligner que même si le formalisme de base de cette modélisation de l'équation de transport de la densité d'interface liquide/gaz 4.79 ne présuppose pas la présence de gouttes liquides, cette hypothèse a tout de même été utilisée afin de fermer les termes sources, notamment au sein de la zone diluée.

4.4.3 Adaptation des modèles existants pour la LES

Il est possible de proposer une équation de transport de la densité d'interface liquide/gaz en LES. Néanmoins, il convient d'adapter les modèles au formalisme de la simulation aux grandes échelles. Dans la suite, on propose d'utiliser l'approche **III** afin d'obtenir une équation de transport de la densité d'interface dans le cadre de la LES d'atomisation. On s'appuiera notamment sur les travaux initiaux de Vallet *et al* [129, 130].

En suivant cette approche, on va postuler une équation de transport de la forme générale suivante :

$$\frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_{\Gamma j} \bar{\Sigma}}{\partial x_j} = \dot{\bar{\Sigma}} , \quad (4.86)$$

où $\bar{u}_{\Gamma j}$ correspond la vitesse de convection de la densité d'interface. Celle-ci est définie comme la « vitesse filtrée de l'interface »[27]. Mais l'utilisation de cette dernière n'est pas aisée, étant donné que cette vitesse de convection est exprimée, au sein du volume de contrôle du filtre, Ω , grâce à une fonction de Dirac centrée sur l'interface, de la manière suivante :

$$\bar{u}_{\Gamma i} = \frac{1}{\bar{\Sigma}} \int_{\Omega} u_i \delta_s d\Omega , \quad (4.87)$$

où δ_s est un Dirac centré sur l'interface liquide/gaz. En outre, cette vitesse n'est pas directement accessible en LES et son effet devra être modélisé. Pour le modèle ELSA, Vallet *et al* [129, 130] proposent d'utiliser la vitesse des phases, $\bar{u}_i$, pour transporter la densité d'interface. Ils réécrivent l'équation 4.86 comme :

$$\frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_j \bar{\Sigma}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\bar{\Sigma} (\bar{u}_\alpha - \bar{u}_{\Gamma\alpha})) + \dot{\bar{\Sigma}} . \quad (4.88)$$

Il faut alors modéliser le premier terme du membre de droite de cette dernière équation, qui peut être vu comme terme de glissement de vitesse. Vallet *et al* [129, 130] utilisent une loi du type gradient (c. f. équation 4.79), c'est l'approche suivie dans ce travail.

Les termes dans le membre de droite doivent rendre compte des phénomènes physiques à l'origine de la destruction ou de la production d'interface. Si bien que le terme source $\dot{\bar{\Sigma}}$, ici, se décompose en une somme de plusieurs termes sources :

$$\dot{\bar{\Sigma}} = \dot{\bar{\Sigma}}_{int} + \dot{\bar{\Sigma}}_{vap} + \dot{\bar{\Sigma}}_{mix} . \quad (4.89)$$

Il est possible d'identifier dans le cas d'un jet d'atomisation :

Production/destruction due à l'étirement, la turbulence et les interactions entre les structures liquides, $\dot{\bar{\Sigma}}_{int}$: Ce terme représente la production/destruction induite par l'écoulement lui même. En effet, l'interface sera plissée par le cisaillement de vitesse entre la phase liquide et la phase gazeuse. Les tourbillons turbulents vont également influencer l'interface de façon significative (figure 4.20(a)). Enfin, les collisions entre les structures liquides peuvent également conduire à une production ou une destruction d'interface. Ces collisions pouvant mener au fractionnement ou à la coalescence (figures 4.20(b) et 4.20(c)). A titre d'exemple, on peut citer les travaux de thèse de Tanguy [125] sur la simulation de collisions binaires de gouttes en DNS. Les résultats, par ailleurs bien corrélés avec les travaux expérimentaux de Ashgriz *et al* [1], montrent un comportement clairement différent selon les paramètres d'impact. Sur les figures 4.18 et 4.19(a) on peut observer les résultats obtenus. La première collision montre une coalescence complète ce qui a pour effet de diminuer la quantité de surface. Tandis-que pour la deuxième il y a apparition d'une goutte satellite menant à l'augmentation de la quantité de surface. Ce que l'on peut observer quantitativement sur la figure 4.19(b) où est tracée l'évolution de la quantité de surface en fonction du temps.

Au final, beaucoup de phénomènes coexistent et il est difficile de déterminer l'importance relative de chacun, d'autant qu'ils sont tous en interaction au sein du volume de contrôle.

Production/destruction due à la vaporisation, $\dot{\bar{\Sigma}}_{vap}$: Pour des gouttes, la vaporisation entraîne une diminution de la quantité d'interface liquide/gaz. La figure 4.21 montre, par exemple, les résultats d'une simulation DNS réalisée par Tanguy [125]. Il se trouve

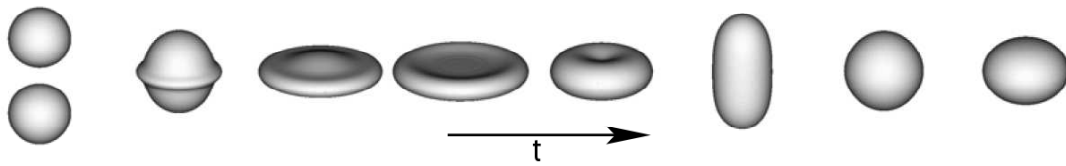
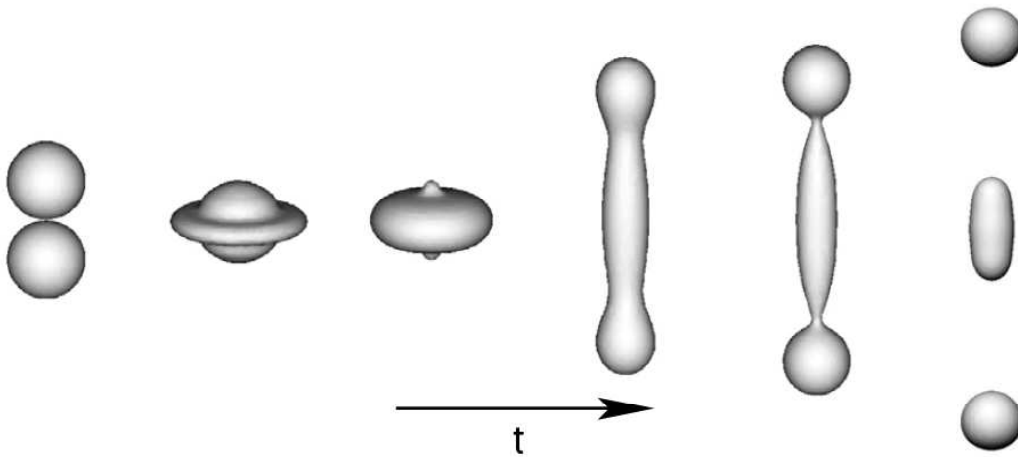
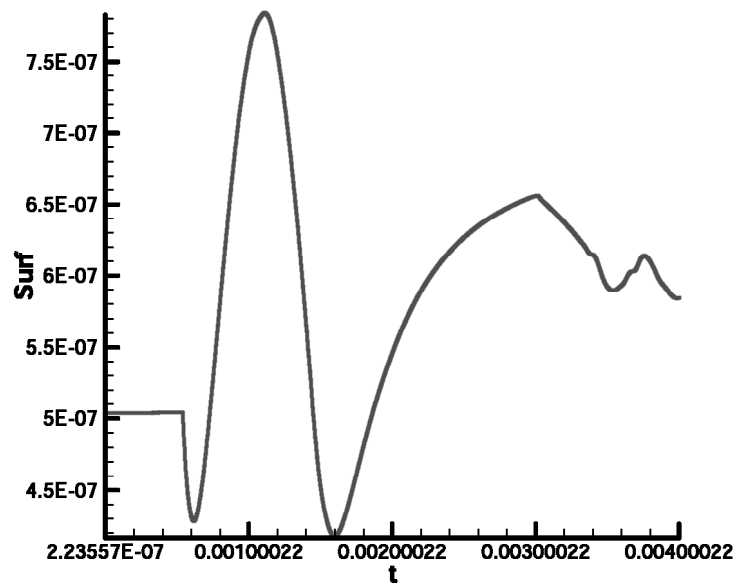


FIGURE 4.18 – Collision binaire gouttes obtenu par Tanguy [125]. Cet impact mène à une coalescence qui globalement réduit la quantité d'interface.

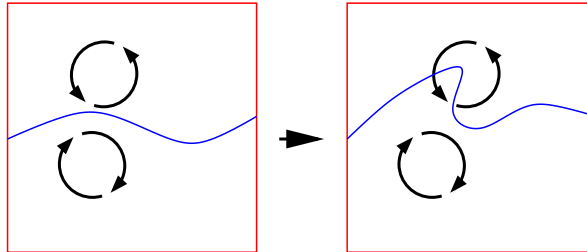


(a) Collision de 2 gouttes menant à l'apparition d'un satellite.

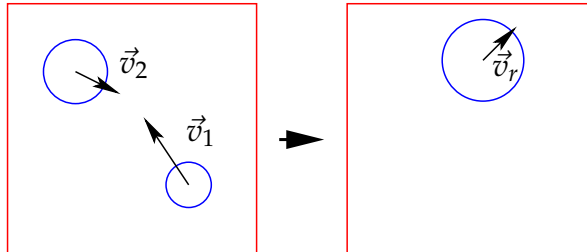


(b) Evolution de la quantité de surface, au cours du temps, relative à la collision (a)

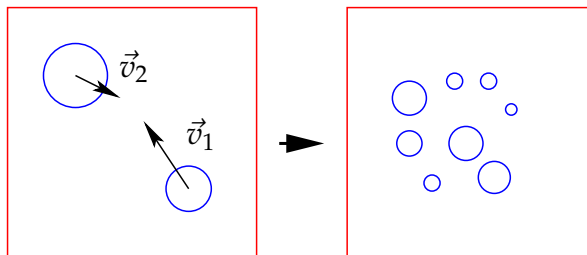
FIGURE 4.19 – Impact binaire de gouttes simulé en DNS par Tanguy [125] (a). Cet impact conduit, globalement, à une augmentation de la quantité de surface (b).



(a) Production de quantité d'interface par plissement.



(b) Destruction de quantité d'interface par coalescence.



(c) Production de quantité d'interface par *breakup*.

FIGURE 4.20 – Exemples de phénomènes physiques influençant la production/destruction de la densité d'interface, en (a) l'interface est plissée par la turbulence. Sur (b) et (c) une collision binaire de structures liquides (ici des gouttes) entraîne la destruction et la production d'interface, respectivement.

qu'il est difficile de prendre en compte ce terme de vaporisation dans le cadre DNS. D'une part, à cause de la discontinuité de vitesse à travers l'interface et d'autre part, l'interface possède, alors, sa propre vitesse de régression. Dans le formalisme RANS, afin de rendre compte des effets de vaporisation sur la densité d'interface, Lebas *et al* [65, 67], se basent sur la loi en « D^2 », ce qui naturellement impose une vision sphérique des gouttes liquides, toujours difficile à justifier dans la zone dense. Notons toutefois que ces derniers auteurs ont remarqué que les conditions de saturation étaient très rapidement atteintes dans la zone dense.

Ainsi, dans le cadre de ces travaux de thèse, on se restreint aux cas d'atomisation sans phénomène de vaporisation, d'où $\dot{\bar{\Sigma}}_{vap} = 0$. Cependant, la prise en compte de la vaporisation devra, à terme, être prise en compte et fait clairement partie des perspectives de ce travail.

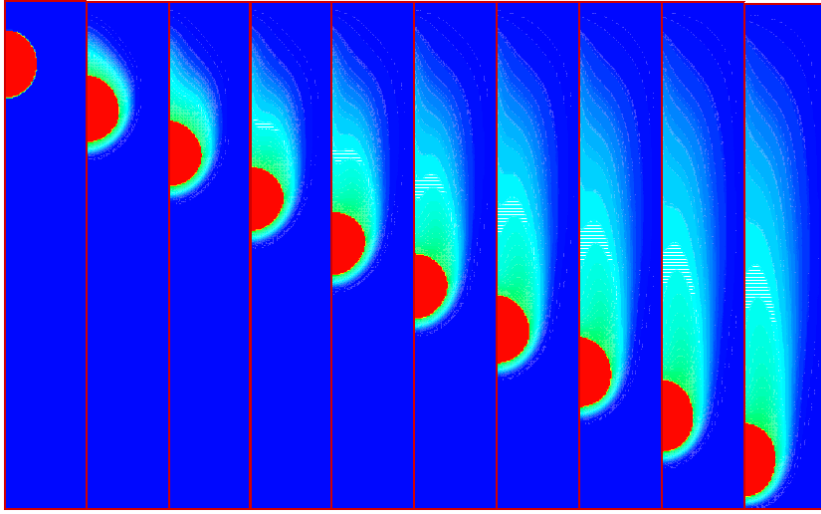


FIGURE 4.21 – Champ de vapeur obtenu pour une goutte en évaporation (en rouge), dans le cadre DNS par Tanguy [125].

Production d'interface due au mélange liquide/gaz, $\dot{\bar{\Sigma}}_{mix}$: Si la fraction de volume est telle que : $0 < \bar{\Phi} < 1$, alors il existe nécessairement une certaine quantité d'interface. L'existence de ce terme n'est pas clairement définie, par exemple il n'apparaît pas dans le formalisme de surface de flamme. Néanmoins, ce terme peut être vu comme un terme source d'initialisation, dans la mesure où les autres termes sources ne peuvent initier la densité d'interface au début de l'injection. Ce problème est évoqué par Vallet *et al* [130] qui proposent d'injecter directement la densité d'interface aux conditions limites d'injection. Beau [6] utilise une relation basée sur le cas limite de gouttes en milieux dispersés. Nous reviendrons plus longuement sur ce terme dans la suite en proposant une modélisation.

4.4.3.1 Modélisation du terme de glissement, $\bar{\Sigma}(\bar{u}_\alpha - \bar{u}_{\Gamma\alpha})$

Dans le cadre des approches RANS, en milieux dispersés, ce terme a été assimilé au glissement. Ainsi, dans le cas de gouttes, Iyer *et al* [49] modélisent la vitesse de

transport de la densité d'interface, $\bar{u}_{\Gamma\alpha}$, comme la vitesse des gouttes, $\bar{u}_l$.

En fait, le choix de cette vitesse de convection dépend de la modélisation utilisée. Dans les cas asymptotiques, la vitesse de convection de la densité d'interface peut être soit celle du liquide dans le cas de transport de gouttes, soit celle du gaz dans le cas de bulles. Mais il est dur de justifier l'une ou l'autre solution dans la zone dense.

Dans le cadre des milieux denses, Vallet *et al* [129, 130] ou encore Lebas *et al* [65, 67] modélisent ce terme de glissement par une loi de diffusion standard, telle que :

$$\bar{\Sigma}(\bar{u}_\alpha - \bar{u}_{\Gamma\alpha}) \simeq D_\Sigma \frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial x_\alpha} . \quad (4.90)$$

Le coefficient de diffusion D_Σ restant à déterminer. Dans le cas des modélisations RANS, les auteurs rapprochent souvent ce problème de celui de la fermeture des flux turbulents. En outre, dans sa modélisation de base, Vallet considère que ce terme rend compte de la diffusion de l'interface par la turbulence. Dans cette optique, D_Σ doit se rapprocher d'un coefficient de diffusion turbulente.

Pour le formalisme LES, il est possible d'utiliser une modélisation de sous maille afin de rendre compte des petites échelles. Par analogie avec la modélisation RANS, on peut imaginer prendre directement le modèle de Smagorinsky [120] pour un scalaire, celui-ci étant aussi un modèle de diffusion. Il vient alors :

$$\bar{\Sigma}(\bar{u}_\alpha - \bar{u}_{\Gamma\alpha}) \simeq -2C_s \bar{\Delta}^2 |S| \frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial x_\alpha} . \quad (4.91)$$

On peut alors décider de déterminer C_s de façon dynamique ou non.

Il est également possible d'utiliser un modèle de similarité d'échelle vu au chapitre précédent. En outre, si l'on assimile $(\bar{u}_\alpha - \bar{u}_{\Gamma\alpha})$ au glissement de la phase liquide, c'est-à-dire que l'on suppose que l'écart à la vitesse moyenne est le même pour la fraction de volume résolue, $\bar{\Phi}$, et pour la densité d'interface, $\bar{\Sigma}$, il peut être préférable d'utiliser une modélisation identique. On propose donc de modéliser le terme de glissement comme :

$$\bar{\Sigma}(\bar{u}_\alpha - \bar{u}_{\Gamma\alpha}) \simeq C_\Sigma \left(\widehat{\bar{u}_\alpha \bar{\Sigma}} - \widehat{\bar{u}_\alpha} \widehat{\bar{\Sigma}} \right) , \quad (4.92)$$

avec C_Σ une constante que l'on prendra égale à C_Φ , utilisée pour la modélisation du terme de sous maille de la fraction de volume résolue, $\bar{\Phi}$ (c.f. équation 4.17).

4.4.3.2 Traitement du terme d'initialisation, $\dot{\bar{\Sigma}}_{mix}$

Ce terme est problématique mais néanmoins nécessaire afin d'initier la densité d'interface dans l'équation de transport 4.88. En effet, il est clair au début de l'injection que $\bar{\Sigma} = 0$ dans tout le domaine, celui-ci étant rempli de gaz. Ainsi, si l'on décide d'utiliser une formulation proche de 4.79 proposée par Vallet *et al* [129, 130] alors, au début de l'injection, ni les termes sources, ni les conditions aux limites ne peuvent initier la densité d'interface, dans la mesure où les termes sources ont $\bar{\Sigma}$ comme facteur multiplicateur. La buse d'injection, quant à elle, est considérée remplie de liquide sans

interface (à moins d'un écoulement cavitant, ce qui ne sera pas considéré). Ainsi la condition limite d'injection pour la densité d'interface devrait être $(\bar{\Sigma})_{lim} = 0$.

Dans les faits, il est souvent d'usage d'injecter le jet liquide avec une certaine densité d'interface. Ensuite, les termes sources feront évoluer la quantité d'interface au sein du domaine de calcul à partir de cette densité d'interface initiale. Néanmoins, il est attendu que l'influence de cet ajout soit faible et disparaisse loin de la zone proche injecteur. Vallet *et al* [129, 130] proposent, par exemple, une estimation numérique de la densité d'interface au bord des lèvres de l'injecteur. Considérant que, dans cette zone, l'interface est un plan au sein de chaque maille de calcul alors la valeur de la densité d'interface initiale Σ_{ini} peut être trouvée de façon géométrique. Elle est de l'ordre de $\Sigma_{ini} = 1/\Delta$, avec $\Delta = \sqrt[3]{\Delta_x \Delta_y \Delta_z}$ étant la taille mono dimensionnelle typique de cette maille (c.f. figure 4.22).

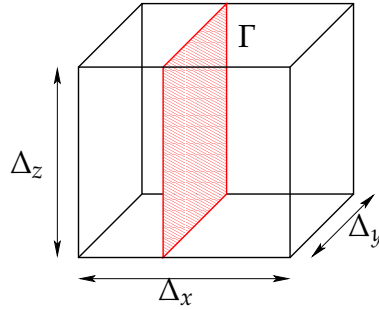


FIGURE 4.22 – Dans le modèle de Vallet *et al* [129, 130] l'interface (symbolisée par Γ ici) est considérée comme étant un plan au sein des mailles proches injecteur, ce qui permet de trouver une condition limite pour la densité d'interface. Pour ce cas précis, il vient : $\bar{\Sigma} = 1/\Delta_x$ si $\Delta_x = \Delta_y = \Delta_z$.

De leur côté, Beau [6] puis Lebas *et al* [65, 67], proposent d'utiliser une relation dans le cas limite de bulles ou de gouttes dans un milieu dispersé. Ils arrivent ainsi à écrire une relation entre le terme source d'initialisation et la fraction de volume :

$$\dot{\bar{\Sigma}}_{mix} \simeq \frac{12\bar{\rho}^2 \mu_t}{\rho_l \rho_g Sc_t l_t} \frac{\partial \tilde{\Phi}_l}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{\Phi}_l}{\partial x_i} , \quad (4.93)$$

où l_t est une échelle intégrale de turbulence. Les auteurs supposent entre autre que les premières échelles des structures liquides sont proportionnelles à l_t . En outre, les auteurs montrent que la zone d'influence de ce terme d'initialisation reste cloisonnée près du nez de l'injecteur.

Dans ce travail de thèse, une troisième alternative est considérée afin de rendre compte de ce terme d'initialisation. En effet, on propose de décomposer la densité d'interface en une partie moyenne $\bar{\Sigma}_{min}$, plus une fluctuation $\bar{\Sigma}'$, tel que :

$$\bar{\Sigma} = \bar{\Sigma}_{min} + \bar{\Sigma}' . \quad (4.94)$$

Dans l'absolu $\bar{\Sigma}_{min}$ devrait représenter la surface « minimale » que l'on peut trouver au sein d'un volume de contrôle pour une fraction de volume de liquide donnée. En effet, si au sein de ce volume de contrôle la fraction de volume est telle que $\bar{\Phi} \in]0, 1[$, alors il

doit exister une densité d'interface puisque les 2 phases sont présentes. Et sa valeur est au moins égale à $\bar{\Sigma}_{min}$.

Du point de vue de la simulation aux grandes échelles, $\bar{\Sigma}_{min}$ peut être vue comme la densité d'interface résolue. En effet, la LES induit, dans son formalisme, que la résolution d'échelles de plus en plus petites devrait garantir de retrouver des résultats DNS. En ce sens, la décomposition 4.94 est en accord avec les principes du modèle LES d'atomisation. En effet, lorsque les échelles de courbure sont bien résolues par le maillage LES, la densité d'interface $\bar{\Sigma}$ dégénère naturellement vers cette densité d'interface résolue $\bar{\Sigma}_{min}$ qui assure l'existence de cette quantité d'interface minimale.

En faisant l'hypothèse que la densité d'interface est au minimum $\bar{\Sigma}_{min}$, son équation de transport devrait donc contenir le terme source $\dot{\bar{\Sigma}}_{mix}$. *A contrario*, il n'apparaît alors pas dans l'écriture de l'équation de transport de la fluctuation :

$$\frac{\partial \bar{\Sigma}'}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_i \bar{\Sigma}'}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\bar{\Sigma}' (\bar{u}_\alpha - \bar{u}_{\Gamma\alpha}) \right) + \dot{\bar{\Sigma}}_{int} . \quad (4.95)$$

Ce qui permet donc au final de s'affranchir du terme source problématique. L'intérêt de cette décomposition 4.94 ne vaut, évidemment, que si il est possible de trouver une relation entre la partie minimale, $\bar{\Sigma}_{min}$, et la fraction de volume, dans la mesure où le terme source $\dot{\bar{\Sigma}}_{int}$ dépend toujours de $\bar{\Sigma}$. On cherche alors une relation de la forme :

$$\bar{\Sigma}_{min} = f(\bar{\Phi}) . \quad (4.96)$$

Dans les faits, au sein d'un volume de contrôle cubique, cette densité d'interface « minimale » correspond souvent à une interface plane coupant ce volume. Ce qui correspond à des cas géométriques relativement simples. Dans la suite on propose donc une étude sur la densité d'interface réalisée sur des cas analytiques puis à partir des données DNS afin de modéliser cette fonction f .

4.4.3.3 Modélisation du terme $\dot{\bar{\Sigma}}_{int}$

Pour ce terme, il existe des modélisations basées sur l'atomisation de gouttes, dérivées des méthodes développées pour les particules. C'est ce que proposent Iyer *et al* [49], Vallet *et al* [129, 130] ou encore Lebas *et al* [67].

Par exemple, on peut modéliser le phénomène de breakup en usant d'un temps caractéristique τ_b , définit dans le modèle wave développé par Reitz [105]. Ce modèle postule que les blobs liquides de longueur caractéristique r_p se « divisent » en goutte ayant un rayon r_c stable. Iyer *et al* [49] écrivent alors le taux de variation suivant, dû au phénomène de breakup :

$$\frac{dr_p}{dt} = \frac{r_p - r_c}{\tau_b} . \quad (4.97)$$

Étant donné la formulation 4.74 sur le diamètre moyen des gouttes, il vient :

$$\bar{\Sigma} = \frac{3\bar{\Phi}}{r_p} \text{ et } \bar{\Sigma}_{crit} = \frac{3\bar{\Phi}}{r_c} . \quad (4.98)$$

Cette dernière relation permet d'écrire le taux de variation du diamètre des gouttes du au breakup :

$$\left(\frac{d\bar{\Sigma}}{dt} \right)_{breakup} = -3 \frac{\bar{\Phi}}{r_p^2} \frac{dr_p}{dt} = \frac{\bar{\Sigma}}{\tau_b} \left(1 - \frac{r_c}{r_b} \right) . \quad (4.99)$$

Cependant, ces modèles sont approchés et reposent sur l'hypothèse de gouttes. Si l'on veut garder une forme plus générale, on suppose, à l'instar de Vallet *et al* [129, 130] ou encore Lebas *et al* [67], une forme du terme source du type :

$$\dot{\bar{\Sigma}}_{int} = \frac{\bar{\Sigma}}{\tau_b} \left(1 - \frac{\bar{\Sigma}}{\bar{\Sigma}_{crit}} \right) . \quad (4.100)$$

Cette relation rejoint l'idée d'un temps de retour à l'équilibre introduit par Vallet *et al* [129, 130]. Clairement ce terme source fait tendre la valeur de $\bar{\Sigma}$ vers sa valeur d'équilibre, $\bar{\Sigma}_{crit}$ au bout d'un temps de « relaxation », ici τ_b . On utilisera pour τ_b un temps LES relatif à la turbulence. Il faut se donner une relation afin d'obtenir une valeur de $\bar{\Sigma}_{crit}$, c'est ce que l'on propose de faire en utilisant la notion de nombre de Weber critique. Ce genre d'approche a été testé dans le cas dilué, par rapport à des modèles Lagrangien et donne des résultats satisfaisants (c.f. Luret *et al* [83]).

Densité d'interface à l'équilibre $\bar{\Sigma}_{crit}$: C'est la densité d'interface correspondant à un diamètre critique stable. Dans le but conserver la cohérence de notre formulation, on décompose $\bar{\Sigma}_{crit}$ en une partie moyenne et sa fluctuation, à l'instar de 4.94 :

$$\bar{\Sigma}_{crit} = \bar{\Sigma}_{min} + \bar{\Sigma}'_{crit} . \quad (4.101)$$

Afin de modéliser cette fluctuation, on définit un nombre de Weber critique de la manière suivante :

$$We_{crit} = \frac{\bar{\rho} \bar{k}}{\sigma \bar{\Sigma}'_{crit}} . \quad (4.102)$$

En faisant l'hypothèse que l'on tend vers l'équilibre, lorsque localement les forces d'inertie sont compensées par les forces de tension de surface, alors le nombre de Weber d'équilibre local est de l'ordre de l'unité. Ainsi, à l'instar de Lebas *et al* [67, 65] dans la partie dense, on fera l'hypothèse suivante :

$$We_{crit} \approx 1 . \quad (4.103)$$

Ce qui permet de trouver une approximation de la densité d'interface d'équilibre, $\bar{\Sigma}_{crit}$:

$$\bar{\Sigma}_{crit} = \bar{\Sigma}_{min} + \frac{\bar{\rho} \bar{k}}{\sigma} . \quad (4.104)$$

Considérant que la majorité de l'énergie de l'écoulement est résolue en LES [120], une approximation de l'énergie cinétique turbulente $\bar{k}$, dans l'équation 4.104, peut être

exprimée en utilisant le tenseur des efforts résolus :

$$\bar{k} = \bar{\Delta}^2 |\bar{S}|^2 , \quad (4.105)$$

avec $\bar{\Delta}$ la taille du filtre LES et $|\bar{S}| = \sqrt{2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij}}$. $\bar{S}_{ij}$ étant le tenseur des efforts résolus, dont l'expression est, pour rappel :

$$\bar{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) . \quad (4.106)$$

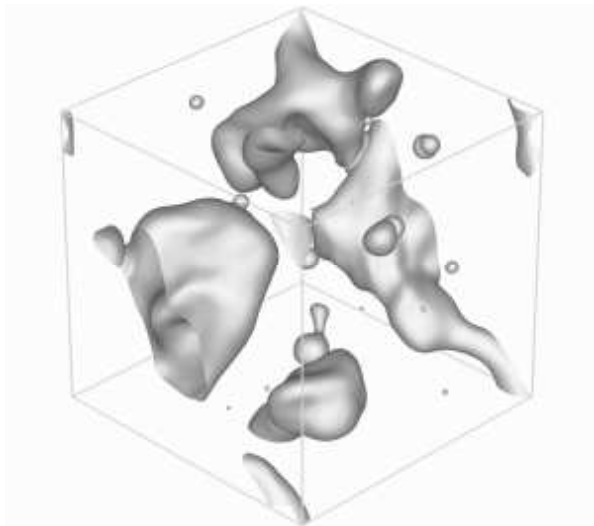
On notera ici que l'hypothèse d'un nombre de Weber critique toujours proche de l'unité, tel que dans l'équation 4.103, est difficile à tester. Il est probable que ce Weber critique dépende de la fraction de volume, $We_{crit}(\bar{\Phi})$, ne serait ce qu'en raison des limites asymptotiques du problème. Luret *et al* [83, 82] proposent une nouvelle approche afin d'étudier We_{crit} . En effet, les auteurs proposent grâce au formalisme DNS de simuler des interactions de structures liquides au sein d'un volume de contrôle (c.f. figure 4.23(a)) tout en maintenant un niveau d'énergie cinétique de turbulence donné. Même si ce travail n'est pas totalement abouti, il permet néanmoins d'obtenir des résultats intéressants. Par exemple, sur la figure 4.23(b) sont tracée les valeurs instantanées de We_{crit} et sa moyenne temporelle, $\overline{We_{crit}} = \int_0^t We_{crit} dt$ avec un rapport de masse volumique de 30 et une fraction de volume liquide de 10%. Ils obtiennent un Weber critique moyen qui tend vers la valeur numérique de 1.3 . Les auteurs ont également étudié l'influence de la fraction de volume sur ce Weber critique moyen (c.f. figure 4.23(c) pour un rapport de masse volumique de 30). En réalité, beaucoup de configurations sont possibles, notamment en terme de rapport de masse volumique et de niveau de turbulence. Cette voie de recherche devrait, à terme, permettre de statuer sur le comportement du Weber critique dans le cadre LES. Pour le modèle, et en attendant des résultats plus définitifs, on se limitera à $We_{crit} = 1$. Notons également que $\bar{\Sigma}_{crit}$ n'est, en théorie, pas défini en l'absence d'interface. En pratique, on propose donc de multiplier l'expression de $\bar{\Sigma}'_{crit}$ par la fonction $\bar{\Phi}(1 - \bar{\Phi})$:

$$\bar{\Sigma}_{crit} = \bar{\Sigma}_{min} + \frac{\bar{\rho} \bar{k}}{\sigma} \bar{\Phi}(1 - \bar{\Phi}) . \quad (4.107)$$

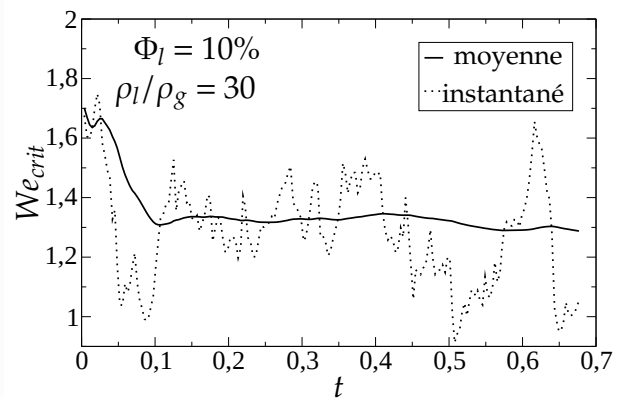
Ce faisant, $\bar{\Sigma}_{crit}$ tend vers 0 lorsque $\bar{\Phi} \rightarrow 0$ ou 1, étant attendu que $\bar{\Sigma}_{min}$ fasse montre du même comportement (ce que l'on propose d'ailleurs d'étudier dans la section suivante). Ainsi, le terme source $\bar{\Sigma}_{int}$ est nul en l'absence d'interface.

Temps de « relaxation » τ_b : On propose d'utiliser un temps turbulent pour τ_b , dans la mesure où dans la zone dense le jet crée sa propre turbulence, le phénomène de breakup se fait principalement sous l'influence de cette dernière. On utilisera donc un temps relatifs à la turbulence en LES :

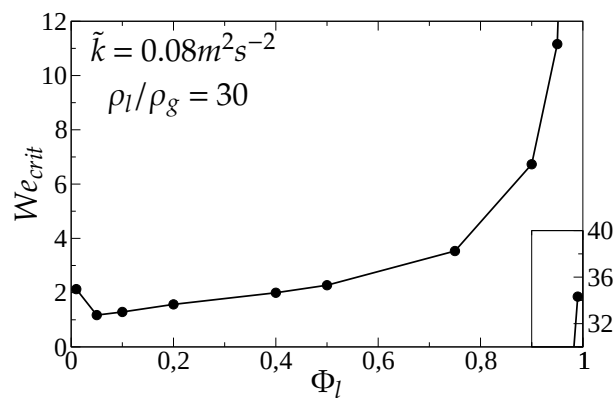
$$\frac{1}{\tau_b} = |\bar{S}| . \quad (4.108)$$



(a) Image instantanée des structures liquides au sein du volume de contrôle



(b) Weber critique instantané et moyenné (temporellement) en fonction du temps



(c) Weber critique moyenné en fonction de la fraction de volume de liquide.

FIGURE 4.23 – Résultats obtenus par Luret *et al* [82, 83].

4.4.4 Etude sur la densité d'interface minimale, $\bar{\Sigma}_{min}$

Au sein de la section 4.4.3.2 on propose une décomposition originale de la densité d'interface en une partie minimale, $\bar{\Sigma}_{min}$, plus sa fluctuation, $\bar{\Sigma}'$. Ceci permet, en outre, de s'affranchir du terme source d'initialisation $\dot{\bar{\Sigma}}_{mix}$ dans l'équation de transport de la fluctuation de la densité d'interface. Néanmoins, il faut modéliser $\bar{\Sigma}_{min}$. On revient donc en quelques points sur l'utilité de cette décomposition et sur les tests qui nous ont permis de trouver une modélisation pour $\bar{\Sigma}_{min}$:

- I. Le transport de la densité d'interface en DNS est difficile et seuls des cas simples ont été étudiés. On renvoie, par exemple, aux travaux de Morel [93] sur ce point.
- II. D'une manière générale cependant, pour le formalisme DNS avec suivi d'interface, il n'est pas nécessaire de connaître la densité d'interface. En effet, la connaissance du champ de fraction de volume liquide, Φ , ou encore de la fonction *level-set*, φ , parfaitement résolu permet de reconstruire l'interface : par exemple avec la méthode PLIC dans la cas du VOF (c.f. Gueyffier *et al* [41]). On peut donc remonter à la densité d'interface *a posteriori*.
- III. Par contre, en LES la fraction de volume n'est plus entièrement résolue et l'utilisation des méthodes de reconstruction développées dans le cadre DNS pose deux problématiques :
 - Il existe, cela a été vu, un problème de définition de l'interface résolue.
 - Même dans l'hypothèse où l'on règle le point précédent, il est probable que l'on obtienne, par reconstruction directe, une quantité d'interface trop petite qui correspond à cette interface résolue. En outre, celle-ci est décrite sur une échelle caractéristique qui est de l'ordre de la taille de la maille de calcul, Δ_x^{LES} , si bien que la quantité d'interface dépend clairement de la résolution spatiale du maillage utilisé.

Ces points, exposés ici, expliquent pourquoi on propose de transporter de la densité d'interface dans le cadre LES, en modélisant, à travers les termes source, les phénomènes à l'origine de la création/destruction de la densité d'interface. Cependant, si l'interface est bien résolue par le maillage LES, $\bar{\Sigma}$ doit être égale à la quantité d'interface que l'on peut reconstruire à partir de la fraction de volume liquide, Φ . Il faut donc faire coïncider le transport de $\bar{\Sigma}$ avec les méthodes évoquées au point II. Dans la décomposition proposée, équation 4.94, on cherche alors à faire correspondre $\bar{\Sigma}_{min}$ avec la densité d'interface que l'on peut obtenir directement avec Φ .

Pour l'expression de la modélisation de ce terme, nous avons donc cherché une relation « quasi » exacte entre $\bar{\Sigma}_{min}$ et la fraction de volume, Φ :

$$\bar{\Sigma}_{min} = f(\Phi) . \quad (4.109)$$

La question posée par l'équation 4.109 s'exprime en ces termes : Quelle est la surface minimale que l'on peut trouver dans un domaine Ω pour une fraction de volume donnée ?

On propose donc, dans la suites, deux études simples pour tenter de répondre à cette question, en premier lieu en prenant comme volume de contrôle un cube, puis une sphère. Ces deux études, vont nous permettre de trouver une expression analytique de la fonction f . De plus, si l'interface est localisée avec précision dans un domaine Ω , ce qui est le cas en DNS, alors le calcul du volume compris sous cette interface devient possible. Par conséquent le calcul de la fraction de volume Φ dans le domaine Ω l'est également. Une étude supplémentaire basée sur les résultats DNS va permettre, sur un cas plus proche des conditions de simulation, de tester la modélisation de $\bar{\Sigma}_{min}$.

4.4.4.1 Étude simple

Un cube est considéré comme volume de contrôle Ω sur la figure 4.24. On considère que ce cube est suffisamment petit pour négliger la courbure de l'interface, si bien que celle-ci peut être représentée comme un plan. Si on prend un point du cube comme référence il est possible de décrire toutes les normales possibles pour l'interface liquide-gaz. En effet, pour couvrir toutes les possibilités il faut et il suffit que $\alpha \in [0, 2\pi]$ et $\theta \in [0, 2\pi]$

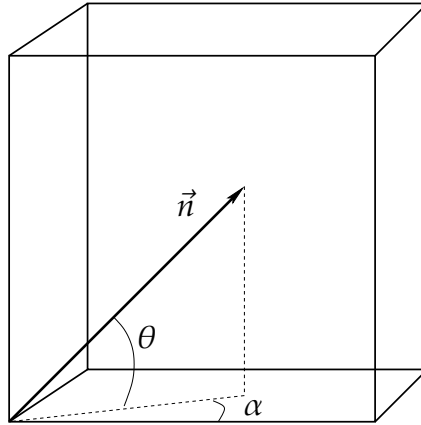


FIGURE 4.24 – Domaine cubique, la normale $\vec{n}$ au plan d'interface est repérée grâce au 2 angles θ et α .

En premier lieu, il convient de noter que si la présence de l'interface n'est pas détectée alors la densité d'interface est nulle, en conséquence on doit avoir :

$$\lim_{\Phi \rightarrow 0} \bar{\Sigma} = 0 \text{ et } \lim_{\Phi \rightarrow 1} \bar{\Sigma} = 0 . \quad (4.110)$$

Une solution analytique simple peut être trouvée lorsque $\alpha = 0$ et $\theta = \pi/4$. Si a est l'arrête du cube alors :

- Pour $\Phi \in [0, 0.5]$, $a\bar{\Sigma} = 2\sqrt{\Phi}$
- Pour $\Phi \in [0.5, 1]$, $a\bar{\Sigma} = 2\sqrt{1-\Phi}$

4.4.4.2 Étude paramétrique sur une sphère

On peut choisir de prendre comme volume de contrôle, Ω , une sphère. L'étude du problème dans une sphère simplifie la tâche car alors le problème est invariant par

rotation et donc ne dépend que de peu de paramètres. Si on coupe une sphère C (c.f. figure 4.25) avec un plan $\mathcal{P}$, il apparaît une surface S que l'on suppose minimale dans ce cas. On peut donc obtenir $\bar{\Sigma}_{min}$ à partir de S . Le calcul de S se résume alors au calcul de la surface d'un disque. Et $\mathcal{V}$ le volume contenu entre la sphère et S est, quant à lui, un volume de calotte de sphère.

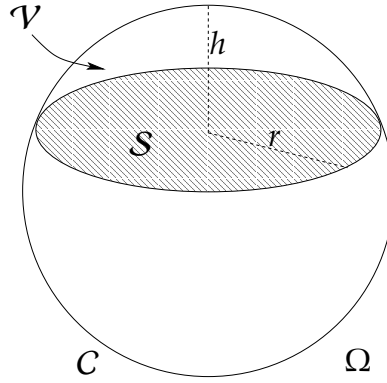


FIGURE 4.25 – Cas de la sphère.

En prenant h la hauteur entre la sphère et le centre de S , r son rayon et R le celui de la sphère, il vient :

$$\mathcal{V} = \pi h^2 \left(R - \frac{h}{3}\right); S = \pi \sqrt{h(2hR - h^2)} , \quad (4.111)$$

en remarquant que $h^2 + r^2 = 2hR$. Le problème ainsi exposé, toutes les variables dépendent alors de h . Cependant, il n'est pas apparu aisé de relier directement $\bar{\Sigma}_{min}$ à Φ . Néanmoins, une étude paramétrique est possible. En effet, en faisant varier h entre 0 et $2R$ on parcourt toutes les valeurs possibles de Φ défini ici comme $\Phi = \mathcal{V}/V_{sphere}$. h permet également d'obtenir $\bar{\Sigma}_{min} = S/V_{sphere}$, on peut alors tracer $\bar{\Sigma}_{min}$, adimensionnée par $a = \sqrt[3]{V_{sphere}}$, en fonction de Φ . Cette courbe est exposée sur la figure 4.26. On remarque que l'on a bien le comportement précédemment décrit, à savoir que $\bar{\Sigma}_{min} \rightarrow 0$ quand $\Phi \rightarrow 0$ ou 1. Nous avons donc cherché à nous rapprocher de cette courbe avec plusieurs fonctions, notamment :

$$a\bar{\Sigma}_{min} = \alpha \sqrt{\Phi(1-\Phi)} . \quad (4.112)$$

Cette fonction est également tracée sur la figure 4.26. On peut remarquer qu'elle est très proche de la courbe obtenue pour la sphère avec $\alpha = 2.4$.

4.4.4.3 Estimation de la densité d'interface minimale : Cas test DNS

L'étude paramétrique précédente a permis d'estimer simplement $\bar{\Sigma}_{min}$ et d'obtenir une approximation avec l'équation 4.112, le volume de contrôle Ω étant une sphère. D'un point de vue pratique, on travaillera sur un maillage cartésien. Ce qui revient à dire que le volume de contrôle Ω est un cube. Il n'est donc *a priori* pas évident que $\bar{\Sigma}_{min}$ soit régit par la même équation 4.112 dans un cas moins théorique se rapprochant des

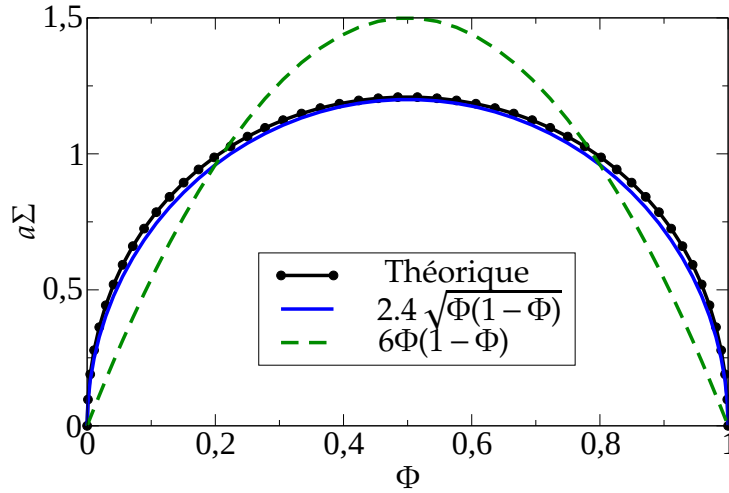


FIGURE 4.26 – Résultats pour le cas de la sphère.

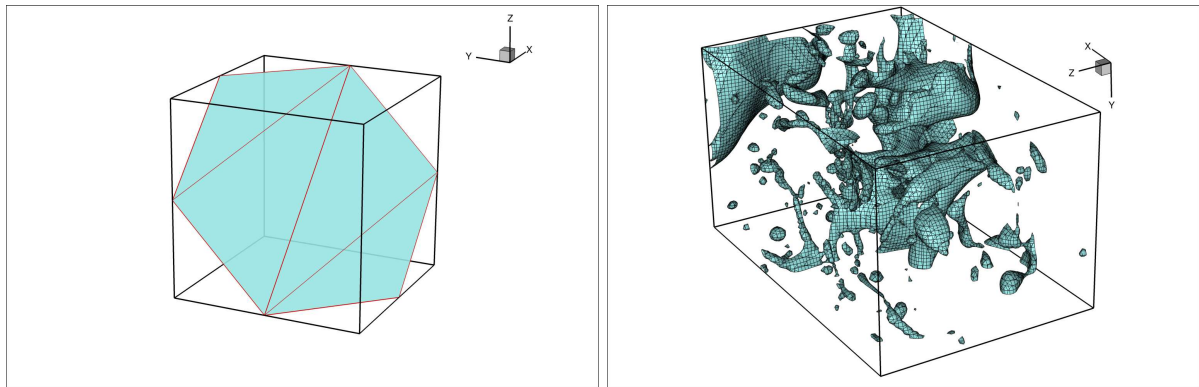
conditions de calculs utilisées. Ce que nous proposons donc de faire ici est d'utiliser les résultats de la DNS d'atomisation afin d'estimer $\bar{\Sigma}_{min}$ dans le cas spécifique de l'atomisation. La simulation DNS permet, en outre grâce à la fonction Level-Set, d'obtenir une reconstruction de l'interface précise dans chaque maille ainsi que la fraction volumique de liquide qui lui est associée. Le calcul se fait en 3 étapes :

Partant d'un champ initial de Level-Set :

1. Reconstruction de l'interface dans chaque maille à partir du niveau 0 de Level-Set.
2. Calcul du volume défini par l'interface précédemment déterminée dans chaque maille.
3. Détermination de la PDF (*Probability Density Function*) jointe $F_{\Sigma\Phi}$ de $\bar{\Sigma}$ et Φ .

Pour les étapes 1 et 2 l'algorithme des *marching cubes* [20] a été utilisé. Celui-ci réalise une triangulation de l'interface au sein des mailles de calcul DNS. La triangulation permet, d'une part, d'être plus précis que la reconstruction utilisant des plans. Par ailleurs, les calculs de la densité d'interface $\bar{\Sigma}$ et de la fraction de volume Φ sont possibles, les points des triangles étant connus. La figure 4.27 montre des exemples de résultats obtenus grâce à cette méthode. Il est possible de reconstruire des isosurfaces assez complexes au sein d'une seule maille (figure 4.27 (a)) celles-ci n'étant pas nécessairement un plan. Sur la figure 4.27 (b) l'algorithme a été appliqué sur un champ de level-set issu de la DNS d'atomisation. On remarque, en outre, que la reconstruction du niveau 0 de la fonction level-set permet d'observer diverses structures telles que des gouttes ou encore des filaments. Ainsi, les domaines de définition de Φ et $\bar{\Sigma}$ sont entièrement balayés. D'autre part, il est important de remarquer que le grand nombre de mailles DNS va garantir un taux d'échantillonnage suffisant pour le calcul de la PDF jointe à l'étape 3.

Les résultats sont visibles sur les figures 4.28(a) et 4.28(b). La figure 4.28(a) présente la PDF jointe $F_{\Sigma\Phi}$ où le champ de couleur représente les valeurs de la densité de probabilité. La courbe modèle de $\bar{\Sigma}_{min}$, utilisée dans le cas de la sphère (équation 4.112) avec $\alpha = 2.4$, est tracée. Sur la figure 4.28(b), la modélisation de $\bar{\Sigma}_{min}$ est comparée à



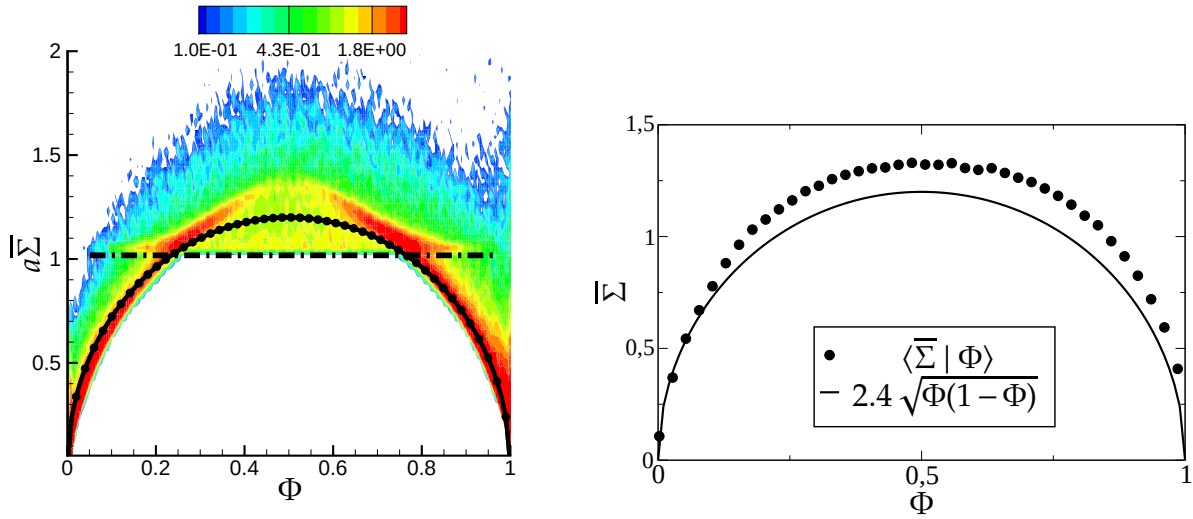
(a) Triangulation de l'isosurface dans une maille de calcul

(b) Exemple de résultat de la triangulation pour une zone du jet DNS (zone très réduite)

FIGURE 4.27 – Résultats de triangulation d'isosurfaces obtenues dans une seule maille (a) . Application au jet DNS (b) avec la reconstruction de l'isosurface level-set=0.

la moyenne de $\bar{\Sigma}$ conditionnée par Φ que l'on note $\langle \bar{\Sigma} | \Phi \rangle$. On rappelle en annexe B l'expression de cette moyenne conditionnée à partir de la PDF jointe, dans le cas continu.

En premier lieu, on remarque que le comportement parabolique de $\bar{\Sigma}$ en fonction de Φ est également présent en considérant un volume de contrôle cubique. Ceci, au regard des *maxima* de densité de la PDF jointe (figure 4.28(a)), ceci est d'autant plus visible sur la figure 4.28(b) où est tracée la moyenne de $\bar{\Sigma}$ conditionnée par Φ . En second lieu, la modélisation proposée dans le cas de la sphère, à savoir $a\bar{\Sigma}_{min} \simeq 2.4 \sqrt{\Phi(1-\Phi)}$, représente bien, globalement, le comportement de la densité d'interface « minimale ».



(a) Pdf jointe de $\bar{\Sigma}$ et Φ , comparaison avec l'équation modèle pour $\bar{\Sigma}_{min}$ (Ligne-points)

(b) Points : Moyenne conditionnée de $\bar{\Sigma}$ par Φ , ligne : Équation modèle pour $\bar{\Sigma}_{min}$.

FIGURE 4.28 – Résultats du test DNS pour l'expression de $\bar{\Sigma}_{min}$.

4.5 Conclusions sur le modèle LES d'atomisation

Dans ce chapitre nous avons détaillé toutes les étapes du développement d'un modèle Eulérien de simulation aux grandes échelles spécifiquement dédié à l'atomisation. Spécifique au sens où il a été montré que l'application des méthodes standards de suivi d'interface et de simulations aux grandes échelles (prenant en compte seulement la turbulence), dans le cadre de l'atomisation liquide/gaz ne sont pas suffisantes. Ceci permet d'extraire deux cas limites qui sont à la base de la modélisation proposée. Soit l'interface est bien décrite, alors on doit rejoindre une vision discrète et explicite de l'interface, à l'instar des méthodes DNS. Soit elle ne l'est pas, auquel cas il faut décrire les phases en termes moyens. Ce qui n'empêche pas, dans les 2 cas, de prendre en compte les termes de sous maille. Le modèle cherche donc à rejoindre ces deux limites.

Dans le modèle proposé, la transition se fait en prenant en compte le terme de sous maille de l'équation de transport de $\bar{\Phi}$. Ce terme peut être petit (c.f. chapitre 3) mais il assure la transition en sous maille, il ne faut donc pas le négliger.

Le modèle propose également de prendre en compte les discontinuités à l'interface ainsi que la force de tension de surface, lorsque celle-ci est suffisamment bien décrite. Ce qui permet de décrire les premières instabilités de l'interface.

Constatant que les structures de sous maille n'ont pas, pour la plupart, une topologie sphérique, le modèle résout une équation de transport de la densité d'interface. La construction de cette équation de transport est basée sur une forme postulée qui contient différents termes source rendant compte de la destruction/création d'interface.

L'intégration de ce modèle dans le solveur Navier-Stokes ARCHER a également été détaillée. Finalement, sur la figure 4.29 on résume l'algorithme menant à la résolution du système établi par le modèle LES d'atomisation.

Dans le prochain chapitre les premiers résultats obtenus avec la modélisation proposée sont analysés sur des cas proches de l'injection Diesel. On cherchera à savoir si le modèle répond bien aux attentes définies dans ce chapitre.

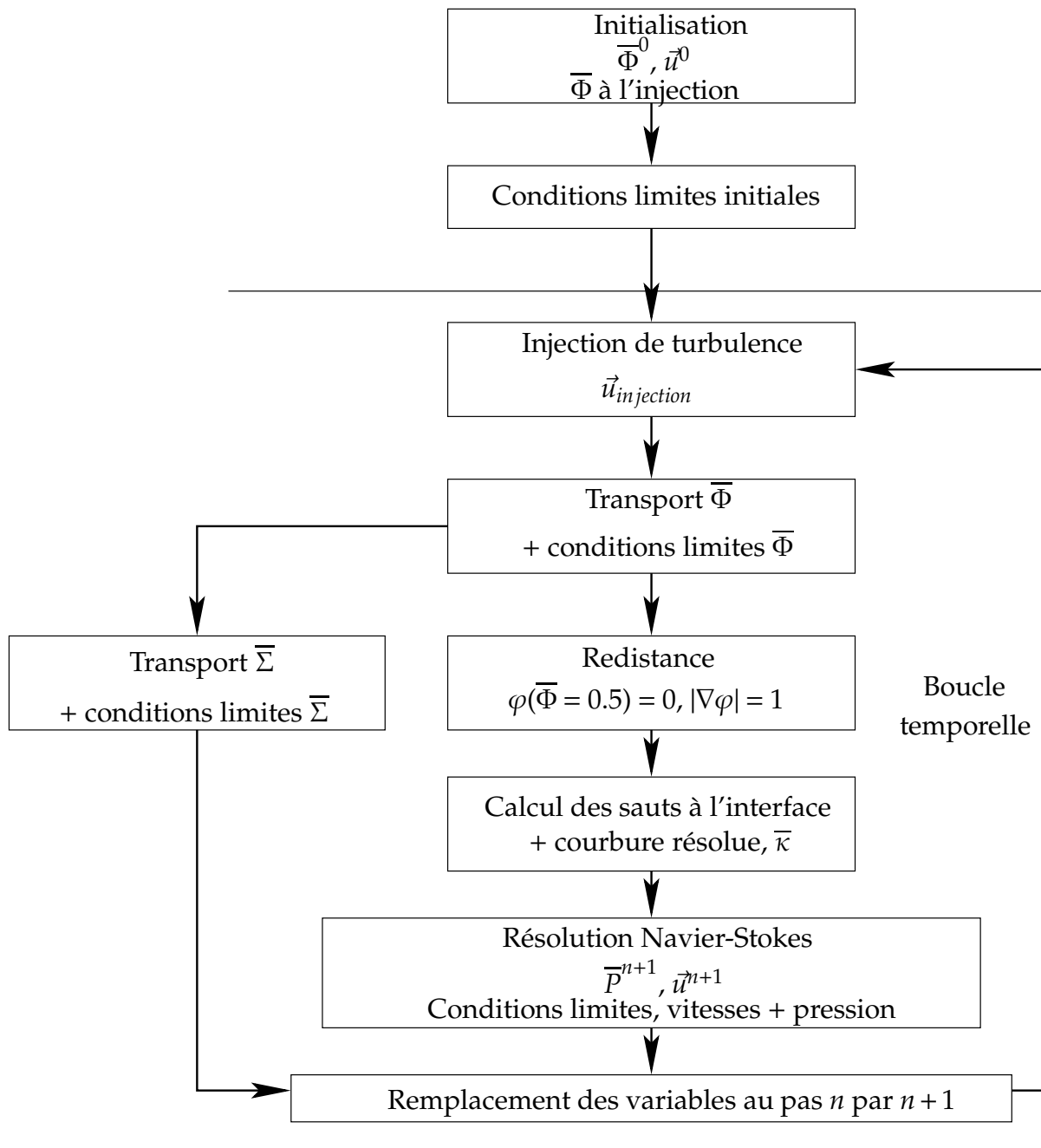


FIGURE 4.29 – Schéma de l'algorithme de résolution du modèle LES.

Chapitre 5

Résultats du modèle LES d'atomisation

LA MODÉLISATION proposée au chapitre précédent est testée ici. Notons que face au manque de données expérimentales en zone très proche injecteur, un cas DNS est utilisé comme référence. C'est pour cela que l'on parlera de comparaison et non pas de validation. On ajoute que, dans la mesure où les simulations présentées ici constituent les premiers essais d'un modèle LES spécifiquement dédié à l'atomisation, ces résultats vont nous permettre de mettre en lumière les problèmes rencontrés et si possible d'envisager des améliorations.

En introduction, on présente donc les cas de calcul choisis pour tester cette modélisation. Dans une deuxième partie on étudiera le comportement qualitatif du modèle, principalement dans le but de montrer que celui-ci répond bien aux objectifs définis dans le chapitre précédent. Ensuite on compare de manière quantitative les statistiques obtenues avec les différents formalismes. On s'interrogera sur la manière de comparer la DNS et la LES, ceci constituant un point fort discuté en modélisation, mais également pour les comparaisons avec l'expérimentation.

Les grandeurs comparées sont donc les moyennes et les écarts types temporels aux grandes échelles des différentes variables du problème. Des grandeurs plus globales sont également comparées comme la longueur de cœur liquide intacte ou encore l'angle de spray.

5.1 Introduction

Pour mener à bien des comparaisons, *a posteriori*, entre la modélisation LES et le cas DNS, il est nécessaire de se définir un cas de référence. Le cas utilisé est exactement identique que celui étudié pour les tests de sous maille au chapitre 3. En effet le solveur ARCHER, en grande partie développé durant les travaux de thèse de ce dernier auteur, a montré sa capacité à rendre compte d'un écoulement de jet liquide en atomisation. Dans la mesure où ce jet à déjà été présenté (c.f. chapitres 3 et 4) on se contente ici de rappeler les paramètres qui le caractérisent sur le tableau 5.1.

Notons tout de même que le cas DNS a été conduit par nos soins afin d'en maîtriser tout les aspects. De plus on montrera dans la suite que cela était nécessaire afin d'obtenir les statistiques voulues et comparables avec les cas LES. Dans l'absolu, il est

souhaitable de disposer de plusieurs configurations afin d'observer si le comportement du modèle que l'on cherche à comparer avec la DNS est bon. En pratique les temps de restitutions sont extrêmement longs, surtout considérant le fait que l'on souhaite disposer de statistiques ayant atteint un certain niveau de convergence.

Concernant la modélisation LES, les temps de restitution sont beaucoup plus courts ¹. Cette souplesse a permis d'effectuer plus de cas de calcul en faisant varier certains paramètres comme la vitesse d'injection, V_{inj} . Il a également été décidé de conduire des cas LES « standards » (*i.e.* méthode VOF avec uniquement le modèle de Smagorinsky [120] pour la turbulence) dans des configurations similaires. Et ce, afin d'observer dans quelle mesure le modèle développé au chapitre précédent apporte une amélioration dans la description du phénomène d'atomisation.

L'ensemble des cas est résumé sur le tableau 5.2 avec les différents modèles utilisés pour les termes de sous maille ainsi que la dénomination de chaque cas. Enfin notons que la comparaison des statistiques issues des différents formalismes est réalisée sur des profils axiaux et radiaux. les profils axiaux seront extraits le long de l'axe du jet dans la direction z . Et les profils radiaux, qui seront obtenus en pratiquant une moyenne radiale, sont extraits en $z = 5, 10$ et 20 diamètre de jet, D_0 . La position de chacun des cas profils est symbolisée en traits pointillés sur le schéma figure 5.1.

Paramètres	Symbole/Unité	Valeurs
Masse volumique gaz	$\rho_g(kg.m^{-3})$	25
Masse volumique liquide	$\rho_l(kg.m^{-3})$	696
Viscosité gaz	$\mu_g(kg.m^{-1}s^{-1})$	1×10^{-5}
Viscosité liquide	$\mu_l(kg.m^{-1}s^{-1})$	1.18×10^{-3}
Tension de surface	$\sigma(N.m^{-1})$	0.06
Diamètre d'injection	$D_0(\mu m)$	100
Vitesse débitante	$U_d(m.s^{-1})$	79
Reynolds liquide	Re_l	4659
Weber liquide	We_l	7239
Intensité de turbulence	$\overline{u'u'}/U^2$	0.05
Echelle caractéristique de turbulence	$L_t(m)$	$0.1D_0$

TABLE 5.1 – Paramètres physiques du cas de référence.

5.2 Comportement qualitatif du modèle

On s'intéresse dans cette section au comportement qualitatif du modèle. Pour cela on observera les champs instantanés de fraction de volume résolue, $\overline{\Phi}$, et de densité d'interface, $\overline{\Sigma}$.

1. Et c'est d'ailleurs là un des intérêts de ce formalisme.

Cas	Mesh	Transport $\bar{\Phi}$	τ_{ij}	τ_{Φ_i}	$V_{inj} (m.s^{-1})$
128DNS	$128^2 \times 1024$	VOF	non	non	100
64LES/VOF	$64^2 \times 512$	VOF	Smagorinsky	non	100
64LESmod	$64^2 \times 512$	WENO	Smagorinsky	Similarité d'échelles	100
64LESmod	$64^2 \times 512$	WENO	Smagorinsky	Similarité d'échelles	200
64LESmod	$64^2 \times 512$	WENO	Smagorinsky	Similarité d'échelles	400
32LES/VOF	$32^2 \times 256$	VOF	Smagorinsky	non	100
32LESmod	$32^2 \times 256$	WENO	Smagorinsky	Similarité d'échelles	100
32LESmod	$32^2 \times 256$	WENO	Smagorinsky	Similarité d'échelles	200
32LESmod	$32^2 \times 256$	WENO	Smagorinsky	Similarité d'échelles	400

TABLE 5.2 – Résumés des cas testés.

5.2.1 Début d'injection

Cette partie présente les résultats obtenus en tout début d'injection. En outre, on cherche à montrer de façon qualitative l'influence du type de modélisation sur les résultats. Un résultat DNS est donc comparé avec deux modélisations LES :

- Comparaison avec deux LES « Standards », qui modélisent seulement la turbulence grâce au modèle de Smagorinsky à travers le termes $\tau_{\rho u_i u_j}$, pour deux maillages différents.
- Puis avec deux LES avec la modélisation proposée dans ce mémoire, où la turbulence est prise en compte par le modèle de Smagorinsky et le terme de sous maille de la fraction de volume liquide, τ_{Φ_i} , par le modèle de similarité des échelles. Toujours pour deux maillages différents.

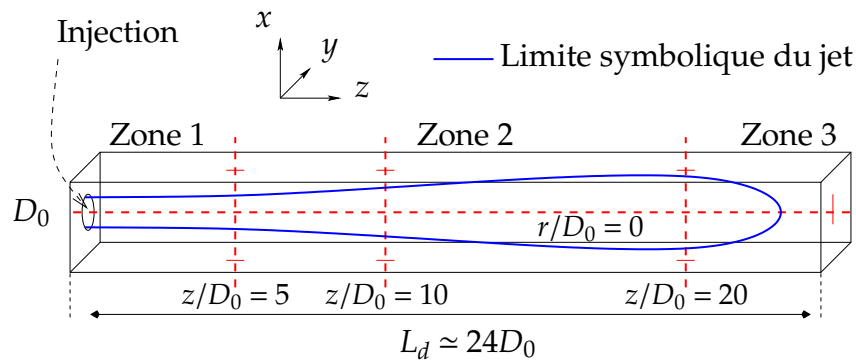


FIGURE 5.1 – Visualisation de la localisation des profils en $z/D_0 = 5, 10$ et 20 . Les profils axiaux, en $z/D_0 = 0$, des différentes variables seront également étudiés.

Type	Modèle turbulence	modèle $\overline{\Phi}$	maillage	figure	Dénomination
DNS	non	non	$128^2 \times 1024$	5.2(a)	DNS
LES	Smagorinsky	non	$64^2 \times 512$	5.2(b) & 5.2(f)	64LES/VOF
LES	Smagorinsky	non	$32^2 \times 256$	5.2(c) & 5.2(g)	32LES/VOF
LES	Smagorinsky	oui	$64^2 \times 512$	5.2(d) & 5.2(h)	64LESmod
LES	Smagorinsky	oui	$32^2 \times 256$	5.2(e) & 5.2(i)	32LESmod

TABLE 5.3 – Configuration des différents cas présenté sur la figures 5.2.

On compare les résultats, au même pas de temps t . Ceux-ci sont visibles sur la figure 5.2. Les différents cas testés sont résumés sur le tableau 5.3 avec les sous-figures correspondantes. Pour chaque cas LES on trace l'isosurface $\overline{\Phi} = 0.5$ (figures 5.2(b) à (e)) ainsi que les coupes correspondantes des champs de $\overline{\Phi}$ dans le plan xy (figures 5.2(f) à (i)). Pour le cas DNS, seule l'interface liquide/gaz est tracée.

La DNS, figure 5.2(a) présente de fortes déformations de la colonne liquide. La tête de celle-ci à une forme assez caractéristique en champignon, cette dernière est à rapprocher de ce que l'on peut observer sur la figure 3.10 (image du haut) pour un cas DNS plus raffiné, ou encore de la figure 1.9(a) en expérimental. Sur cette même figure on constate, dans le rectangle gris, que des gouttelettes, dont les dimensions sont bien inférieures au diamètre du jet, ont déjà été arrachées à colonne liquide.

Sur les deux cas LES « Standards », 64LES/VOF et 32LES/VOF (figures 5.2(a) et (c)) toute la masse de liquide reste cloisonnée dans la colonne liquide et on ne détecte pas, même aux grandes échelles, la présence de gouttes dans la zone considérée en DNS (rectangle gris). Ceci est d'autant plus visible sur les champs de fraction de volume résolus correspondants, figures 5.2(f) et (g), où ceux-ci sont clairement à 1 ou à 0. De plus, la forme en champignon est plus difficilement visible, surtout avec le maillage moins raffiné correspondant au cas 32LES/VOF.

A contrario, qualitativement cette forme est plus aisément détectable sur les cas LESmod (figures 5.2(d) et (e)), y compris pour le cas 32LESmod. Sur les figures 5.2(h) et (i) on peut remarquer que le champ de fraction de volume est diffus. Il est important de noter que ce dernier fait peut permettre de rendre compte de la présence de structures liquides de sous maille dont les dimensions sont trop petites pour être décrites par le maillage LES. Or, c'est précisément ce que l'on observe dans le cas DNS au sein de la zone d'intérêt en gris.

Au final, dans tous les tests menés la forme caractéristique en champignon n'a jamais pu être obtenue avec la modélisation LES « standard » LES/VOF. Alors que l'ajout d'un modèle pour le terme de sous maille de la fraction de volume résolu permet d'obtenir quasi systématiquement cette forme avec la présence de structures de sous maille autour de l'interface liquide/gaz. On en déduit donc que, au-delà du fait de décrire le spray de sous maille, la présence de ce terme de sous maille influence les grandes échelles de l'interface. Ceci permet, du moins de manière qualitative, de retrouver le comportement aux grandes échelles de l'interface en DNS pour le début de l'injection.

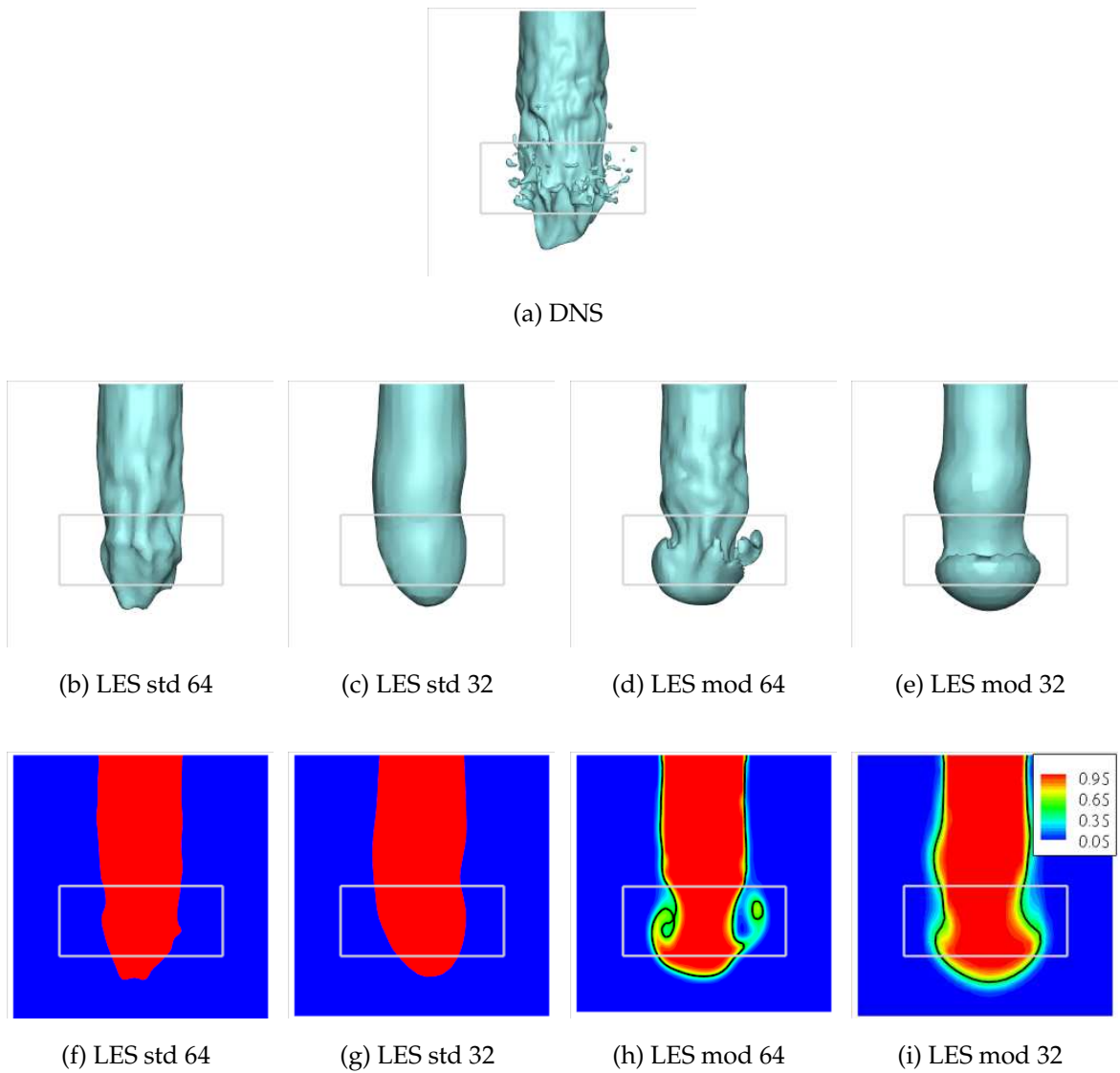


FIGURE 5.2 – Comparaison des résultats en début d’injection avec différentes méthodes.

5.2.2 Fraction de volume résolue, $\overline{\Phi}$

Cette section a pour but de présenter l’évolution temporelle du champ de fraction de volume résolu, $\overline{\Phi}$, obtenue par le modèle LES. La figure 5.3 présente ainsi les champs $\overline{\Phi}$ de 5 pas de temps, du début de l’injection à $t = 9 \times 10^{-7} s$ au jet pleinement développé à $t = 3.18 \times 10^{-5} s$, en $64^2 \times 512$. Sur la figure 5.4 on va s’intéresser à l’évolution temporelle d’une structure particulière, mise en lumière dans le cercle noir. Sur ces figures l’iso-ligne de $\overline{\Phi} = 0.5$ est également tracée, on rappelle que celle-ci constitue l’interface liquide/gaz quand celle-ci est résolue dans la modélisation proposée. En premier lieu on s’intéresse à la figure 5.3. Il est possible d’observer, dans le rectangle bleu en trait plein, qu’une grande partie des déformations de l’interface proche de la sortie de l’injecteur sont décrites. En effet, cette zone est à rapprocher de ce que l’on peut observer proche

injecteur en DNS sur la figure 3.17(a). On notera tout de même que la fraction de volume est diffusée autour de l'interface car toutes les échelles de celles-ci ne peuvent être résolues. Ceci peut traduire la présence de gouttes ou de structures de sous maille d'un coté de l'interface (de l'interface résolue vers le gaz) et la présence d'inclusions gazeuses du coté opposé. Mais cet effet peut également être du à la diffusion des schémas numériques utilisés.

Pour des temps de simulation, à partir de $t = 8.7 \times 10^{-6} s$ figure 5.3(b), les structures ne peuvent plus être résolues explicitement par le maillage LES et la fraction de volume liquide commence à être transférée en sous maille. Ceci est mis en lumière par le cercle rouge pointillé. À mesure que le jet liquide avance dans le domaine de calcul, les structures résolues qui correspondent à l'interface (symbolisée en noire) disparaissent au profit du spray de sous maille.

On peut caractériser le phénomène en observant l'évolution temporelle d'une structure particulière sur la figure 5.4, où les pas de temps sont plus rapprochés. En effet, la structure liquide résolue, entourée d'un cercle noir sur la figure 5.4(a), tend à disparaître à mesure que celle-ci est épluchée par le champ de vitesse. Finalement, celle-ci à quasiment disparue sur la figure 5.4(e), en $t = 3.51 \times 10^{-5} s$, remplacée par un champ diffus correspondant à la quantité de fraction de volume de la structure initiale. On voit donc sur ces dernières figures que le modèle de similarité des échelles utilisé dans l'équation de transport de la fraction de volume résolue se comporte comme un terme de diffusion. Ainsi, dans le modèle c'est ce processus de diffusion de la fraction de volume qui autorise le passage de la vision résolue au spray de sous maille. On comprend dès lors que la maîtrise de la diffusion numérique, principalement due au schéma d'advection de $\bar{\Phi}$, revêt une importance particulière dans la mesure où si celle-ci est trop importante, l'atomisation sera surestimée.

Cependant, d'un point de vue qualitatif le modèle répond globalement aux objectifs initiaux, définis au chapitre 4, qui étaient de pouvoir décrire l'interface lorsque les échelles de celle-ci peuvent être décrites par le maillage, d'une part. Et, d'autre part, de passer continûment vers une description moyenne de la phase liquide au sein des mailles LES lorsque celles-ci ne permettent plus une description explicite des structures liquides. L'étude des figures 5.3 et 5.4 montrent que cela est le cas proche injecteur, où les premières instabilités de l'interface sont captées et plus loin, où le spray est décrit en sous maille.

5.2.3 Densité d'interface, $\bar{\Sigma}$

De la même manière que pour la section précédente on trace les champs de densité d'interface, $\bar{\Sigma}$, figure 5.5, aux mêmes pas de temps, t , que pour la figure 5.3 dans la section précédente. On rappelle que l'on ne résout pas directement l'équation de transport de la densité d'interface mais sa fluctuation $\bar{\Sigma}'$, équation 4.95, avec la modélisation du terme source, $\dot{\bar{\Sigma}}_{int}$ proposée au chapitre 4, dont l'expression est :

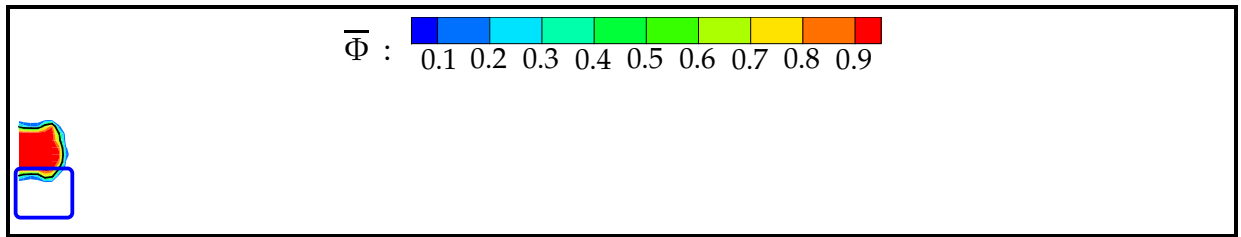
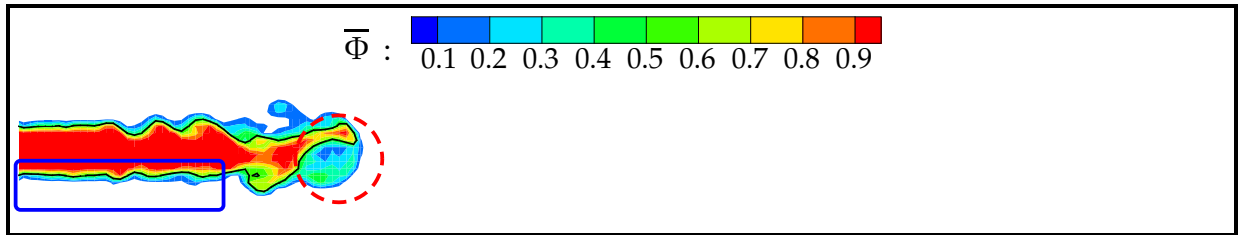
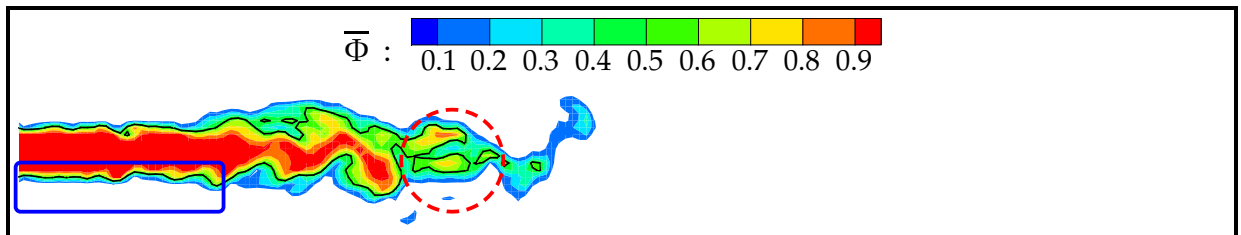
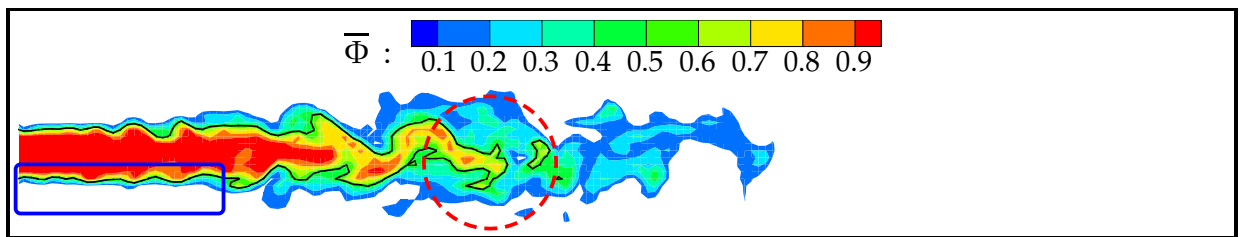
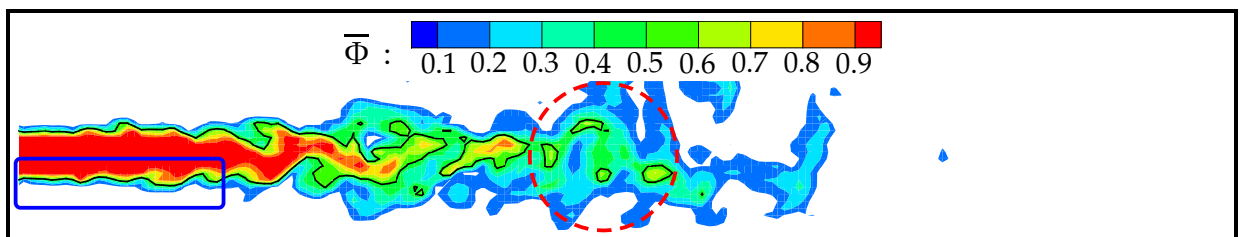
(a) $t = 9 \times 10^{-7} s$ (b) $t = 8.7 \times 10^{-6} s$ (c) $t = 1.49 \times 10^{-5} s$ (d) $t = 2.26 \times 10^{-5} s$ (e) $t = 3.18 \times 10^{-5} s$

FIGURE 5.3 – Évolution temporelle la fraction de volume liquide résolue, maillage $64^2 \times 512$, cas 64LESmod.

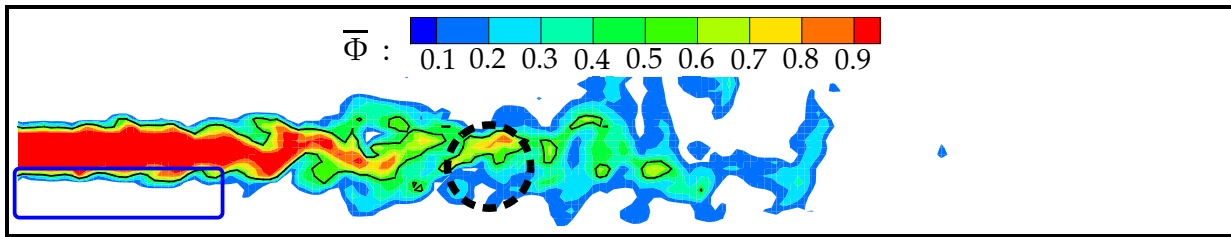
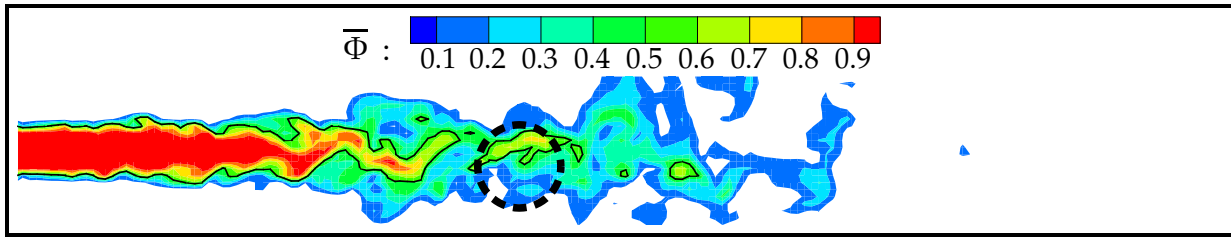
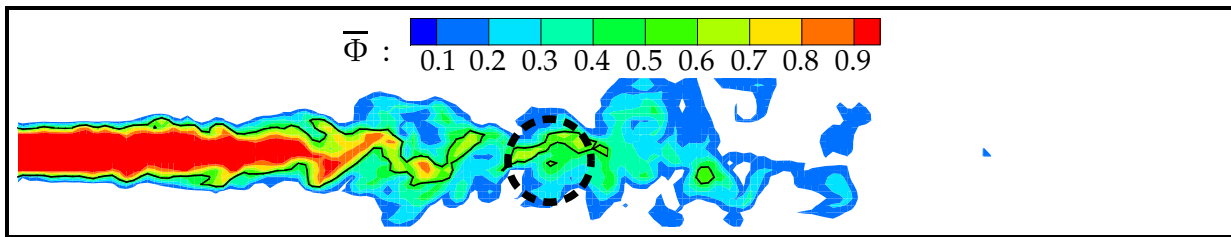
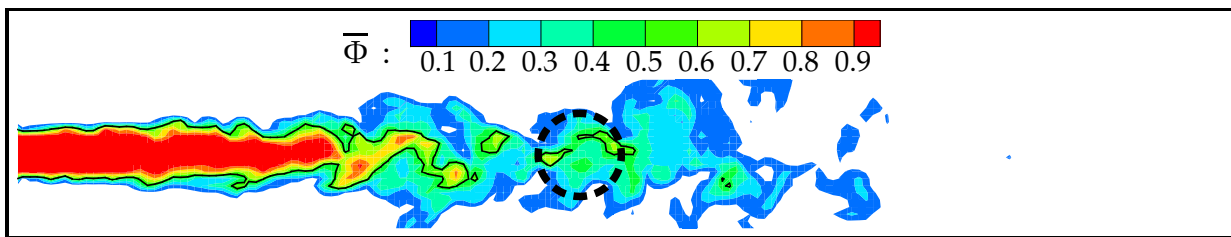
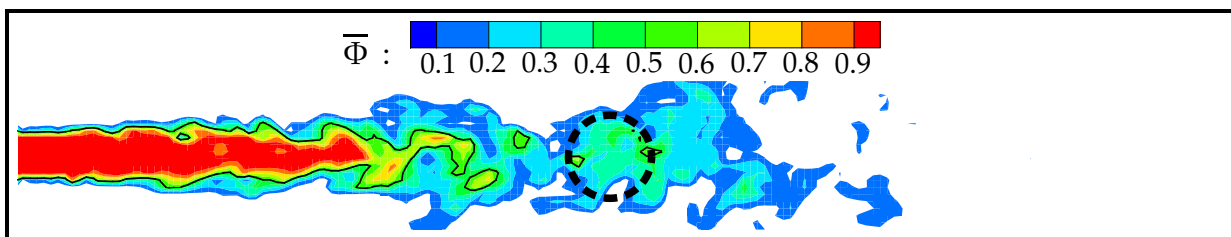
(a) $t = 3.18 \times 10^{-5} \text{s}$ (b) $t = 3.26 \times 10^{-5} \text{s}$ (c) $t = 3.34 \times 10^{-5} \text{s}$ (d) $t = 3.43 \times 10^{-5} \text{s}$ (e) $t = 3.51 \times 10^{-5} \text{s}$

FIGURE 5.4 – Champs instantanés de fraction de volume résolue, maillage $64^2 \times 512$, cas 64LESmod. L'évolution d'une structure liquide est suivie grâce aux cercles noir sur les différentes figures.

$$\dot{\bar{\Sigma}}_{int} = \frac{\bar{\Sigma}}{\tau_b} \left(1 - \frac{\bar{\Sigma}}{\bar{\Sigma}_{crit}} \right) \text{ avec } \begin{cases} 1/\tau_b = |\bar{S}| , \\ \bar{\Sigma}_{crit} = \bar{\Sigma}_{min} + \bar{\Sigma}'_{crit} , \\ \bar{\Sigma}_{crit} = \bar{\rho} \bar{k} / \sigma_{lg} We_{crit} \text{ où } \bar{k} = \bar{\Delta}^2 |\bar{S}|^2 . \end{cases} \quad (5.1)$$

La production de densité d'interface est ainsi contrôlée par 2 mécanismes dans le modèle :

- D'une part, la décomposition 4.94 de $\bar{\Sigma}$ en une partie minimale, $\bar{\Sigma}_{min}$ plus une fluctuation, $\bar{\Sigma}'$, permet de garantir que, lorsque $0 < \bar{\Phi} < 1$ alors $\bar{\Sigma} \geq \bar{\Sigma}_{min}$. Un exemple de champ de densité d'interface minimale, $\bar{\Sigma}_{min}$, est visible sur la figure 5.7(a) à $t = 3.18 \times 10^{-5} s$. Compte tenu de son expression analytique (relation 4.112), établie dans la partie 4.4.4, cette variable est maximale autour de l'interface résolue ($iso-\Phi = 0.5$).
- D'autre part, grâce au terme source $\dot{\bar{\Sigma}}_{int}$. Ce terme source est construit pour influencer sur la production de la densité d'interface vers une valeur à l'équilibre, notée, $\bar{\Sigma}_{crit}$. La relation 5.1 montre que ce terme dépend du taux d'étirement, $|\bar{S}|$, et de $\bar{\Sigma}_{crit}$. On s'intéresse donc également à ces deux grandeurs dont les champs respectifs sont tracés sur les figures 5.6(a) et 5.7(c).

Le développement du jet est présenté sur la figure 5.5. On peut observer sur cette figure que la densité d'interface est produite dès le début de l'injection proche du nez de l'injecteur, là où le cisaillement de vitesse est maximal.

Pour illustrer ces propos, on peut observer, sur un champ instantané en $t = 3.18 \times 10^{-5} s$ figure 5.6(a), que le taux d'étirement $|\bar{S}|$ est maximal autour de l'interface dans la zone proche injecteur. Le terme source de la densité d'interface, $\dot{\bar{\Sigma}}_{int}$, atteint alors ses *maxima* aux mêmes endroits ce qui est cohérent considérant l'expression de ce terme, relation 5.1. En effet, dans cette zone et dans la mesure où l'interface semble bien résolue, la valeur de la densité d'interface a tendance à rejoindre celle de la densité d'interface minimale telle que : $\bar{\Sigma} \rightarrow \bar{\Sigma}_{min}$, si bien que la relation 5.1 permet d'écrire :

$$\dot{\bar{\Sigma}}_{int} \rightarrow \frac{\bar{\Sigma}_{min}}{\tau_b} \left(1 - \frac{\bar{\Sigma}_{min}}{\bar{\Sigma}'_{crit} + \bar{\Sigma}_{min}} \right) . \quad (5.2)$$

On comprend dès lors que cette zone est le principal siège de la production de densité d'interface, considérant d'une part que la relation 5.2 permet d'écrire $\dot{\bar{\Sigma}}_{int} > 0$ et que d'autre part le cisaillement est maximal et par conséquent $|\bar{S}|$ également.

Ceci est visible sur les profils en $z = 1D_0$ et $z = 5D_0$, figures 5.6(b) et (c), où sont tracés les profils dans la direction y du terme source de la densité d'interface et du taux d'étirement, normalisés par leur niveau maximal respectif relevé dans tout le domaine de calcul. On relève en $z = 1D_0$, figure 5.6(b), que les pics de production de $\bar{\Sigma}$ sont centrés sur l'interface (en $y \approx \pm 0.5D_0$) précisément où le cisaillement est maximal. Les figures 5.7(b) et (c), représentant respectivement les champs $\bar{\Sigma}$ et $\bar{\Sigma}_{crit}$, montrent ici que la densité d'interface est loin de l'état d'équilibre. Plus loin, après $z = 5D_0$, figure 5.6(c), le taux de production de densité d'interface est inférieur, le taux d'étirement

étant moindre mais également parce que les structures liquides résolues commencent à être diffusées en sous maille. Ainsi, il n'est plus possible de faire l'approximation permettant de trouver la relation 5.2.

Dans la suite nous montrerons de manière plus quantitative que la production de densité d'interface dépend clairement de la valeur du nombre de Weber critique, We_{crit} , dont la valeur avait été initialement choisie à $We_{crit} = 1$. En outre, les niveaux de densité d'interface en utilisant cette valeur sont bien plus importants comparés à ceux l'on que l'on peut trouver avec le formalisme DNS.

Néanmoins, les différentes figures étudiées dans cette section montrent, d'une part, que la décomposition 4.94 permet d'initier la densité d'interface à sa valeur minimale dans tout le domaine (c.f. figure 5.7(a)) sans recourir à l'utilisation d'une condition limite d'entrée particulière comme cela avait, par exemple, été proposé par Vallet *et al* [129, 130] pour le modèle ELSA (c.f. section 4.4.3.2). D'autre part, le terme source $\bar{\Sigma}_{int}$, tel que celui-ci a été construit, permet bien une production de densité d'interface aux endroits où les conditions turbulentes locales sont fortes (lié à $|\bar{S}|$ en LES) et où un fort déséquilibre existe entre la valeur locale de densité d'interface et sa valeur à l'équilibre, $\bar{\Sigma}_{crit}$, estimée pour des conditions turbulentes identiques.

5.2.4 Échelle de longueur $l_{D_{32}}$

Connaissant les champs de fraction de volume liquide résolue, $\bar{\Phi}$ et celui de la densité d'aire interfaciale, il est possible d'obtenir, *a posteriori*, une échelle de longueur au sein de chaque maille de calcul LES, que l'on notera $l_{D_{32}}$. On l'exprime de la manière suivante :

$$l_{D_{32}} = \frac{6\bar{\Phi}}{\bar{\Sigma}} . \quad (5.3)$$

Cette dernière formulation rejoint l'expression du diamètre moyen de Sauter, D_{32} , si l'on considère avoir une distribution de taille de goutte monodisperse au sein de la maille de calcul.

On précise qu'un spray est dit monodisperse, au sein d'un volume de contrôle, Ω , si les N gouttes qui le composent présentent un même rayon r . On ne fera pas cette hypothèse dans la suite et c'est pourquoi on préférera mentionner que la formulation 5.3 nous permet d'estimer une échelle de longueur caractéristique, plutôt que le diamètre D_{32} dont la distribution au sein de chaque maille est inconnue. Cette échelle de longueur, $l_{D_{32}}$, équivaut alors au diamètre caractéristique des gouttes ayant le même rapport volume/surface que le spray dans son ensemble au sein du volume de contrôle, Ω . Ce dernier est choisi comme étant le volume d'une maille de calcul, soit $V_{\Omega} = \Delta x \Delta y \Delta z$. De plus, notons que l'expression de $l_{D_{32}}$, relation 5.3, considère le cas de gouttes dans un environnement gazeux. En outre, pour $\bar{\Phi} > 0.5$ il est difficile de considérer que cette longueur correspond à un diamètre de goutte. Dans ce cas, il serait préférable de considérer des bulles dans un milieu liquide, l'expression de $l_{D_{32}}$ n'est alors pas la même. Étant donné que l'on s'intéresse principalement à la dispersion du liquide dans notre cas, on ne considérera que les endroits où localement $\bar{\Phi} < 0.5$.

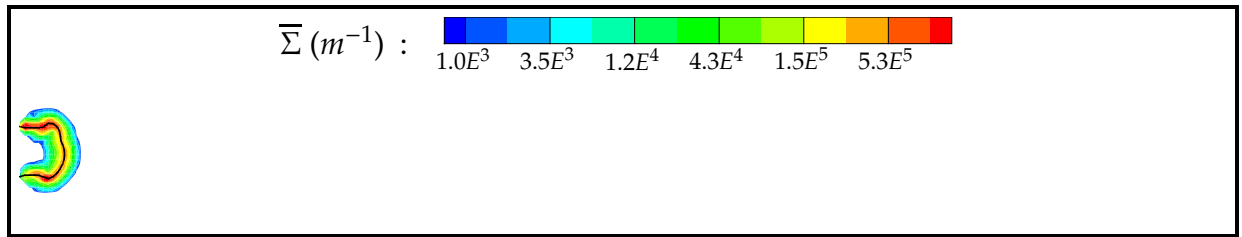
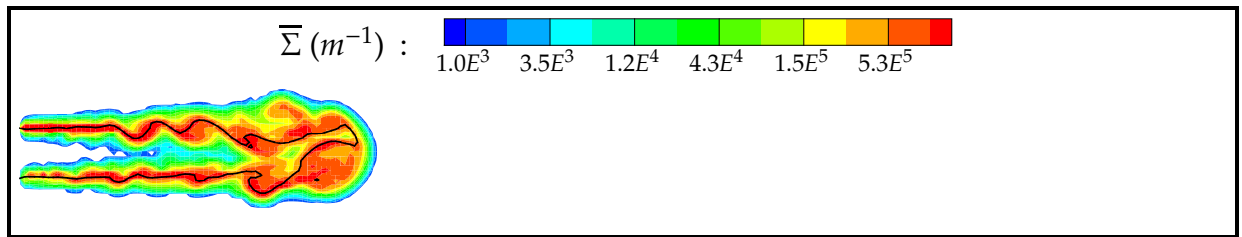
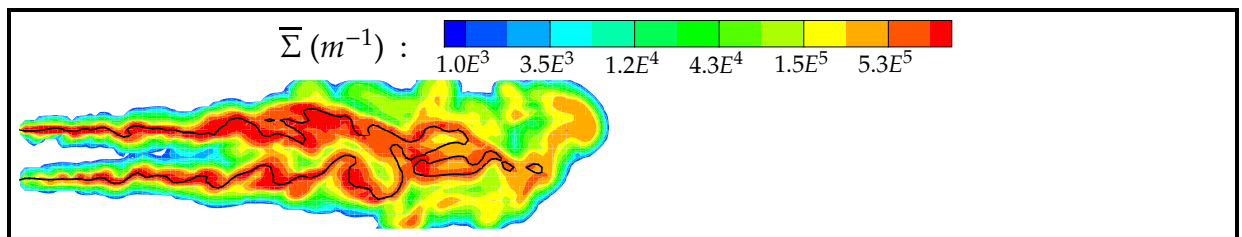
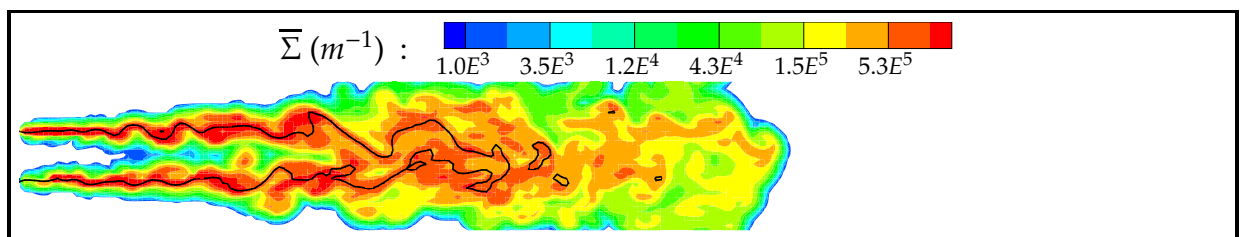
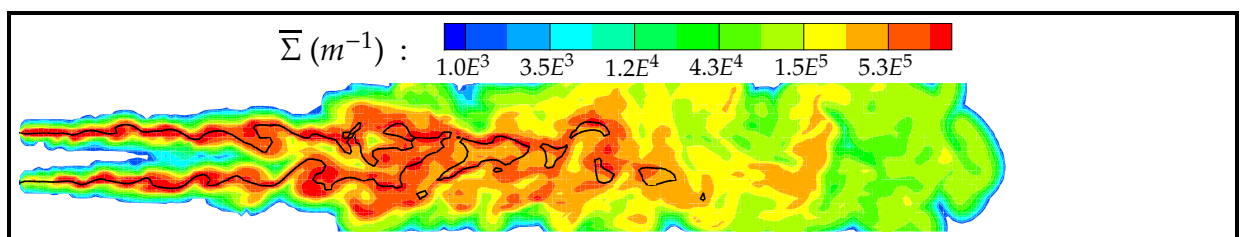
(a) $t = 9 \times 10^{-7}s$ (b) $t = 8.7 \times 10^{-6}s$ (c) $t = 1.49 \times 10^{-5}s$ (d) $t = 2.26 \times 10^{-5}s$ (e) $t = 3.18 \times 10^{-5}s$

FIGURE 5.5 – Évolution temporelle de la densité d'interface liquide/gaz, maillage $64^2 \times 512$.

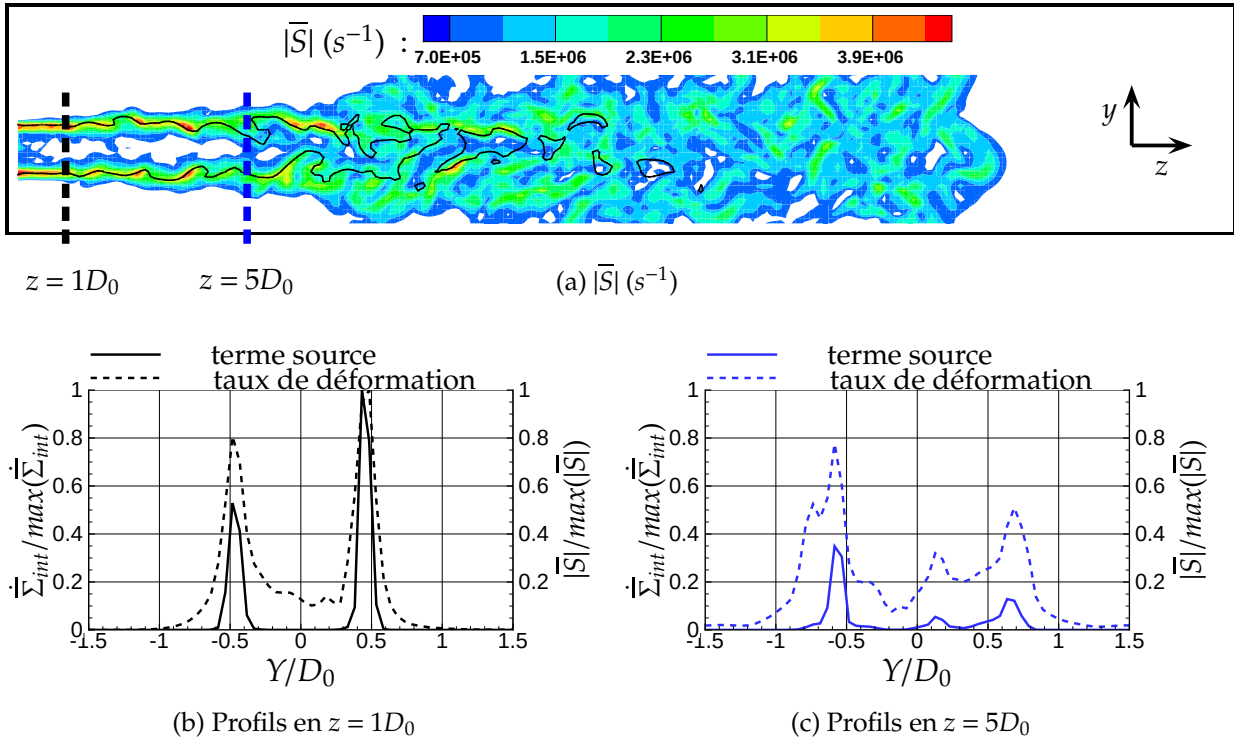


FIGURE 5.6 – Champ de $|\bar{S}|$ à $t = 3.18 \times 10^{-5}s$, en (a), maillage $64^2 \times 512$. Profils de $\dot{\Sigma}_{int}/\max(\dot{\Sigma}_{int})$ (ligne pleine) et $|\bar{S}|/\max(|\bar{S}|)$ (ligne pointillée) en $z = 1D_0$ (c) et $z = 5D_0$ (d).

Il est intéressant de disposer d'une telle grandeur car celle-ci est fréquemment utilisée dans le cadre des sprays, aussi bien d'un point de vue expérimental que dans les simulations CFD utilisant le suivi Lagrangien des gouttes. Par exemple, dans le cadre du modèle ELSA, dans la zone de transition de la vision Eulérienne, en zone dense, vers la vision Lagrangienne, en zone diluée, chaque particule Lagrangienne est initiée avec un diamètre D_{32} dont l'expression est exactement identique à celle de $l_{D_{32}}$ (c.f. description du modèle ELSA, chapitre 2). Il est aussi possible de réaliser le même type de transition Eulérien/Lagrangien en LES, c'est pourquoi il est intéressant d'observer le comportement de cette échelle caractéristique $l_{D_{32}}$ calculée avec le présent modèle. Les figures 5.8 et 5.9 présentent ainsi les champs de $l_{D_{32}}$ obtenus avec le modèle à différents temps d'injection, t . Comme cela a déjà été précisé, il est possible d'observer sur ces deux figures que seuls les champs pour $\bar{\Phi} < 0.5$ sont représentés. Enfin, il est à noter que le champ de couleur sur ces figures est en échelle $\log$ afin de pouvoir distinguer plusieurs ordres de grandeurs pour la longueur, $l_{D_{32}}$. On gardera néanmoins une échelle de couleur identique sur toutes ces figures.

La figure 5.8 montre l'évolution de cette échelle lors du développement du jet. Il est visible que des structures de petites dimensions sont produites dès le début de l'injection, figure 5.8(a) autour de l'interface. Précisons que ces structures ne sont pas forcément des paquets liquides qui se détachent, mais il peut simplement s'agir de plis de l'interface. La présence de ces structures est détectée tout au long du développement

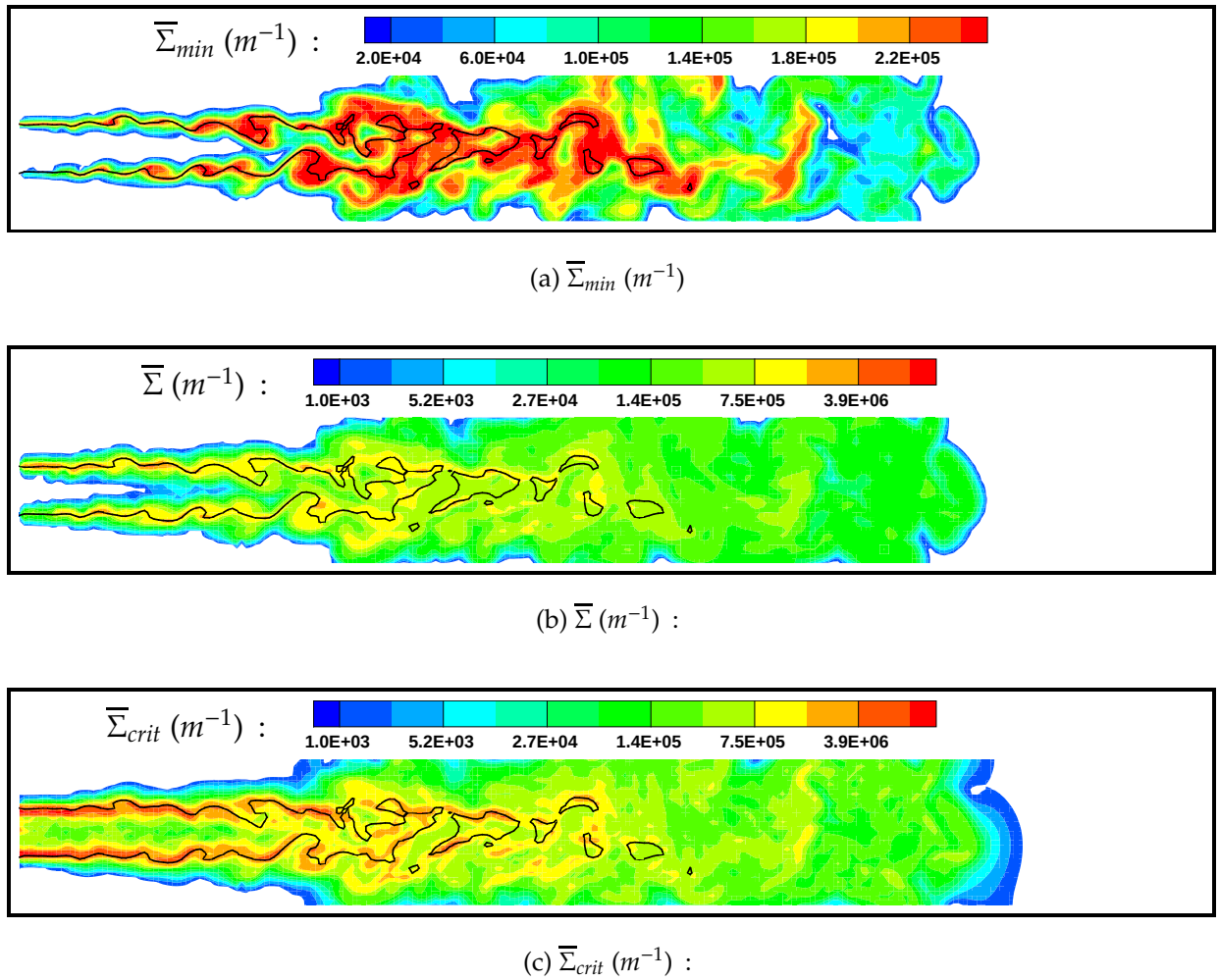


FIGURE 5.7 – Comparaison des champs de $\bar{\Sigma}_{min}$, en (a), $\bar{\Sigma}$, en (b), et $\bar{\Sigma}_{crit}$, en (c). Maillage $64^2 \times 512$. Les champs de couleur sont identiques pour les figures (b) et (c).

du jet dans la région proche injecteur (rectangle bleu figure 5.8(a) à 5.8(e)). Ceci est à relier aux observations effectuées sur les champs de densité d'interface, $\bar{\Sigma}$ dans cette zone où celle-ci est maximale (figure 5.5).

A partir de $t = 1.49 \times 10^{-5}s$, figure 5.8, des structures résolues commencent à se détacher du cœur liquide, celles-ci sont en grande partie à l'origine des zones où les valeurs de $l_{D_{32}}$ sont les plus grandes. Ceci est visible dans le cercle bleu, sur la figure 5.8(d), où l'on peut observer que les structures résolues qui n'ont pas encore totalement diffusées sont accompagnées d'un champ de $l_{D_{32}}$ élevé. Ce qui peut alors correspondre à des gouttes arrachées à ces structures résolues et qui n'ont pas encore été dispersées dans le domaine de calcul. On peut observer la dynamique du phénomène sur la figure 5.9 où l'on s'intéresse plus particulièrement à l'impact de l'évolution de deux structures résolues (cercles noirs et bleus) sur le champ de $l_{D_{32}}$. On peut constater qu'à mesure que ces structures résolues diffusent en sous maille, de la figure 5.9(a) à 5.9(e), elles génèrent un spray de sous maille dont la dimension caractéristique est initialement de

l'ordre de la taille de la maille de calcul Δ_x^{LES} .

Plus loin, sur figure 5.8(e), il est possible d'observer que peu de structures résolues atteignent la fin du domaine de calcul ($z \sim 20D_0$), dans la zone symbolisée par le cercle noir. Néanmoins, dans cette zone, l'échelle $l_{D_{32}}$ diminue, ce qui signifie que le spray continu à se fragmenter sous l'effet des interactions de sous maille du spray. Dans le modèle, ces dernières s'expriment principalement à travers le terme source $\dot{\bar{\Sigma}}_{int}$ et le terme de glissement de la densité d'interface (c.f. section 4.4.3.1), ceux-ci influencent directement le comportement de l'échelle $l_{D_{32}}$ que l'on peut relever dans cette zone. Ainsi même si la fraction de volume, $\bar{\Phi}$ est faible dans cette zone, 5.3(e), la densité d'interface reste relativement élevée, ce qui signifie que le spray de sous maille correspondant est très fragmenté.

Au final, sur tous ces champs, l'échelle $l_{D_{32}}$ est de l'ordre du μm ce qui est compatible avec les tailles de gouttes que l'on peut relever expérimentalement pour ce type d'injection.

Pour conclure sur le comportement qualitatif du modèle, on présente la figure 5.10. Sur celle-ci l'iso-surface représente l'interface résolue ($\bar{\Phi} = 0.5$) et le champ de couleur correspond au champ de l'échelle $l_{D_{32}}$. Cette figure donne alors une vision globale du modèle LES d'atomisation avec la colonne de liquide dont les premières instabilités peuvent être décrites sur le maillage LES et le spray de sous maille dont les dimensions ne permettent plus une résolution explicite, celui-ci étant représenté à travers le champ $l_{D_{32}}$ ici. Cette figure rejoint alors l'idée générale du modèle, schématisée sur la figure 4.8.

5.3 Grandeurs moyennes et comparaison avec la DNS

Dans cette section, on cherche à caractériser de manière quantitative les résultats obtenus avec le présent modèle LES d'atomisation. En outre, à des fins de comparaison dans ces travaux, une simulation DNS d'un jet d'atomisation a été réalisée permettant ainsi une comparaison du comportement statistique des variables hydrodynamiques obtenues en LES. Ceci constitue alors une comparaison dite *a posteriori* entre les formalismes DNS et LES à l'opposé des tests *a priori* réalisés au sein du chapitre 3.

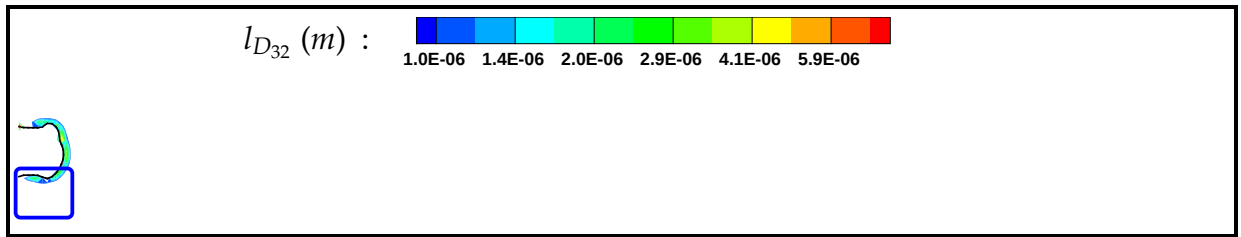
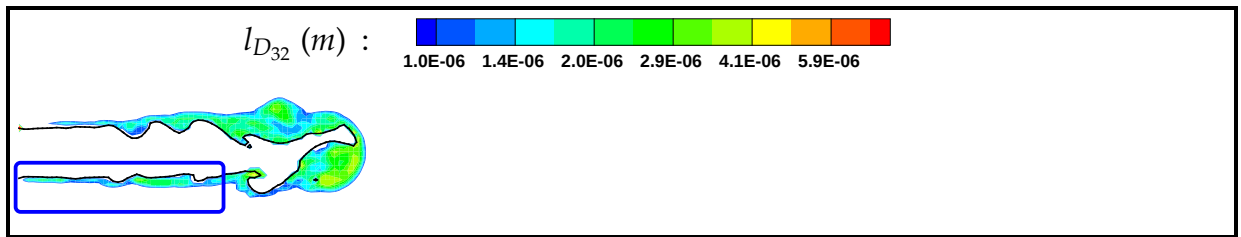
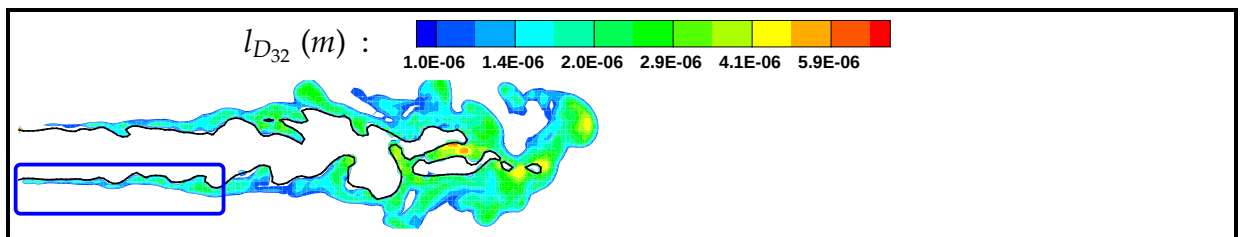
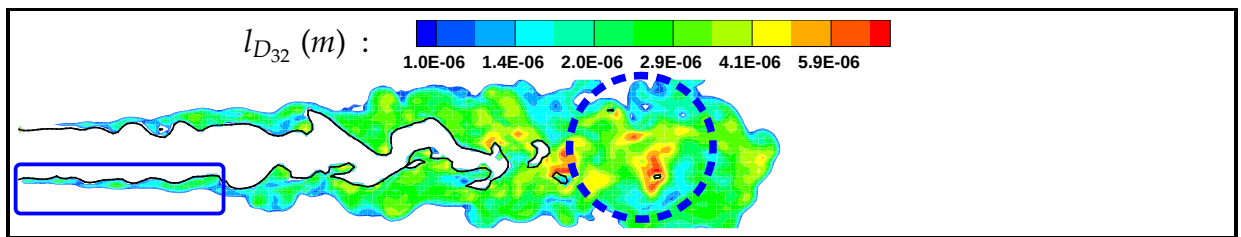
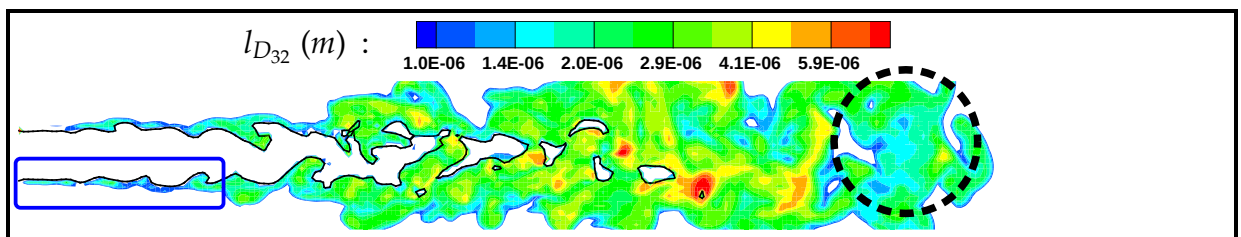
Un des tous premiers choix d'analyse statistique se porte sur les moments temporels d'ordre un et deux. C'est-à-dire sur la moyenne temporelle, que l'on définit de manière continue pour une variable quelconque, Q , par :

$$\langle Q \rangle_{x,y,z} = \lim_{(t_2-t_1) \rightarrow \infty} \frac{1}{t_2-t_1} \int_{t_1}^{t_2} Q(x,y,z,t) dt , \quad (5.4)$$

et l'écart type², exprimé pour Q comme :

$$S_{Dev}(Q)_{x,y,z} = \sqrt{\langle Q^2 \rangle_{x,y,z} - \langle Q \rangle_{x,y,z}^2} . \quad (5.5)$$

2. Notons ici que le moment d'ordre 2 correspond formellement à la variance qui s'exprime pour Q : $\langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2$. Néanmoins dans ce manuscrit on fait le choix d'utiliser l'écart type.

(a) $t = 9 \times 10^{-7} s$ (b) $t = 8.7 \times 10^{-6} s$ (c) $t = 1.49 \times 10^{-5} s$ (d) $t = 2.26 \times 10^{-5} s$ (e) $t = 3.18 \times 10^{-5} s$ FIGURE 5.8 – Évolution temporelle de l'échelle de longueur $l_{D_{32}}$, maillage $64^2 \times 512$.

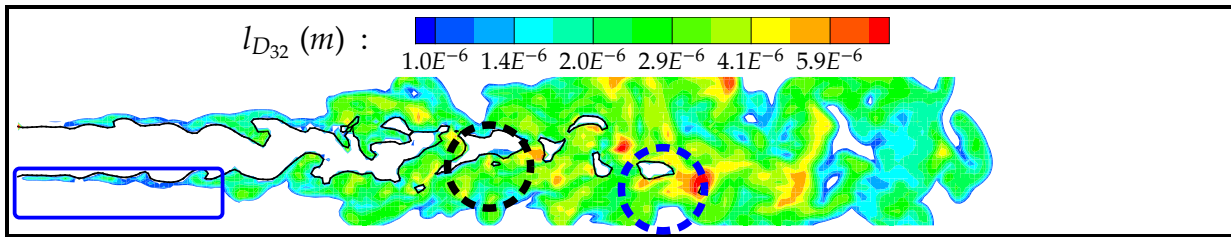
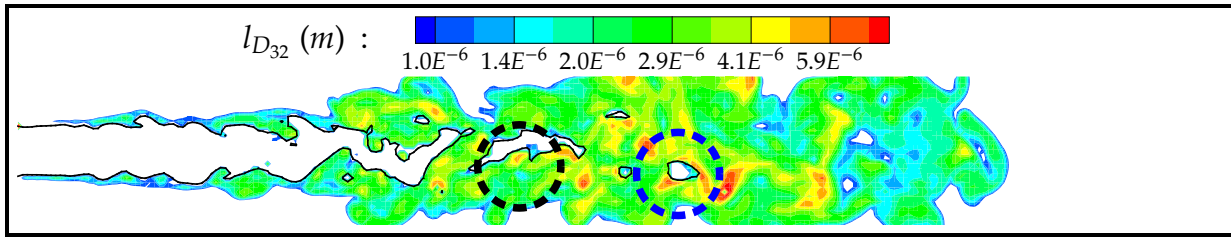
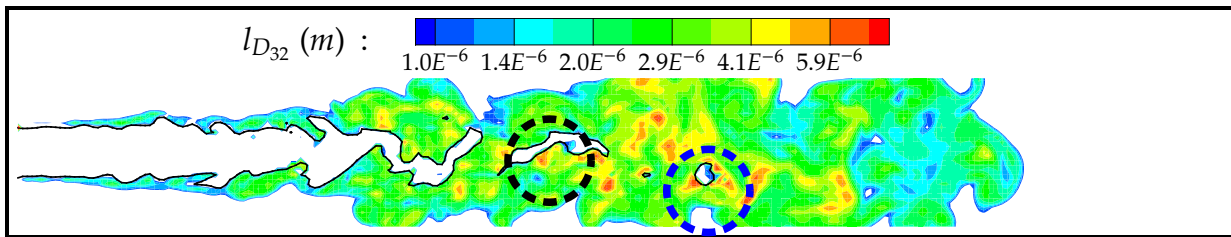
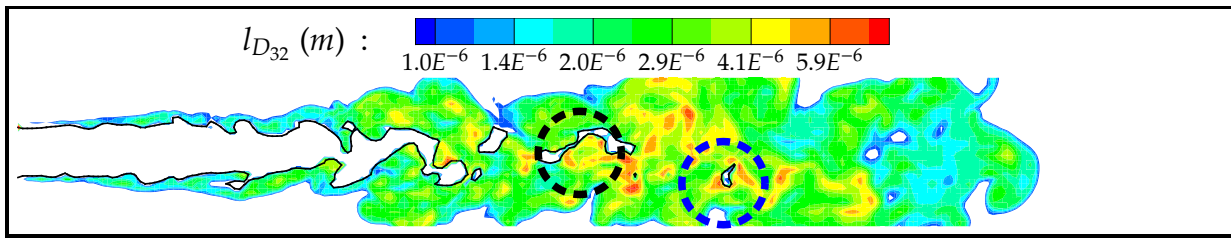
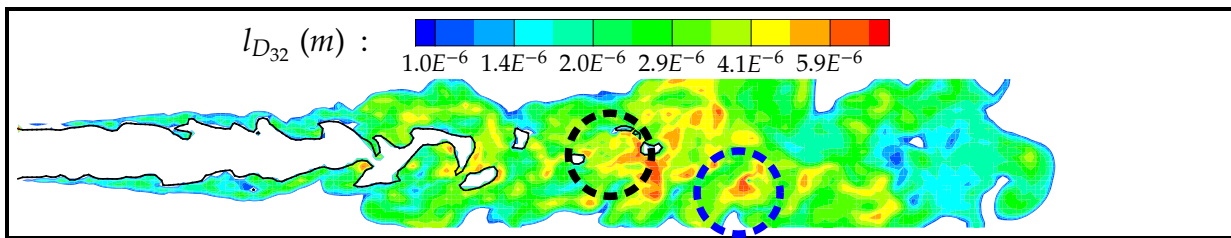
(a) $t = 3.18 \times 10^{-5}s$ (b) $t = 3.26 \times 10^{-5}s$ (c) $t = 3.34 \times 10^{-5}s$ (d) $t = 3.43 \times 10^{-5}s$ (e) $t = 3.51 \times 10^{-5}s$

FIGURE 5.9 – Champs instantanés de l'échelle $l_{D_{32}}$, maillage $64^2 \times 512$. L'évolution de deux structures liquides est suivie grâce aux cercles noir et bleu sur les différentes figures.

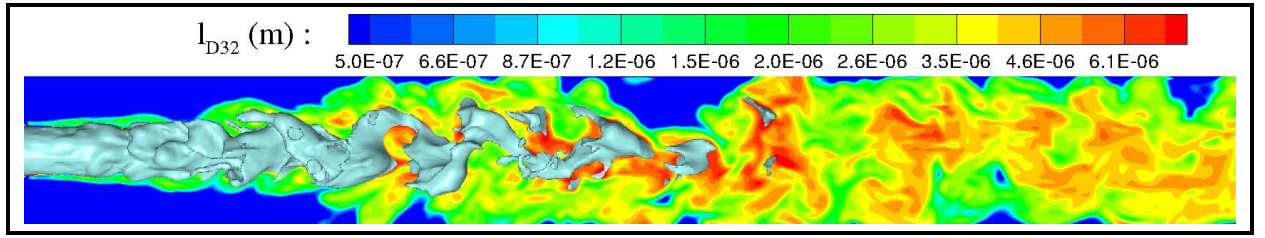


FIGURE 5.10 – Champ instantané de l_{D32} , maillage $64^2 \times 512$. Isosurface de fraction de volume $\bar{\Phi} = 0.5$.

L'étude de la variance en LES paraît envisageable dans la mesure où, en théorie, une majorité d'échelles sont résolues. On peut alors espérer pouvoir obtenir des niveaux de variance satisfaisants comparés aux résultats DNS. Nous avons donc voulu tester ce point particulier.

Néanmoins, et de la même manière que pour les tests *a priori* menés au chapitre 3, quelques remarques sont nécessaires concernant cette comparaison *a posteriori*. En effet, dans une première approche on obtient à partir de la simulation DNS les statistiques non filtrées $\langle Q \rangle$ et $S_{Dev}(Q)$ alors qu'avec le formalisme LES on ne peut obtenir directement que les champs $\langle \bar{Q} \rangle$ et $S_{Dev}(\bar{Q})$ aux grandes échelles, soit avec une taille de filtre quelconque correspondant à $\bar{\Delta}$. Il convient de se demander dans quelle mesure les statistiques des résultats issus des formalismes DNS et LES se comparent.

Il est intéressant de noter qu'une problématique similaire apparaît lorsque l'on cherche à comparer des résultats issus de simulation LES avec des résultats expérimentaux, surtout si l'on considère que la DNS peut se concevoir comme une « expérience numérique ». Ainsi, des auteurs tels Veynante *et al* [132] en 2006 ou encore Kempf [55] en 2008 notent que l'on ne peut pas toujours comparer directement les statistiques issues du calcul LES et expérimentales sans prendre quelques précautions. En outre, Veynante *et al* [132] montrent que si l'on suppose que l'échelle longueur caractéristique des variables statistiques, L_Q , est supérieure à l'échelle du filtre³, tel que $L_Q \gg \bar{\Delta}$ il vient alors $\langle \bar{Q} \rangle \approx \langle Q \rangle$ et $\langle Q^2 \rangle \approx \langle \bar{Q}^2 \rangle$, d'où :

$$\langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2 \approx \underbrace{\left[\langle \bar{Q}^2 \rangle - \langle \bar{Q} \rangle^2 \right]}_{\text{variance résolue}} + \underbrace{\left[\langle \bar{Q}^2 - \bar{Q}^2 \rangle \right]}_{\text{variance de sous maille}}. \quad (5.6)$$

La variance de la variable Q est alors la somme de la variance résolue, $\bar{Q}$, et de la moyenne (temporelle) de la variance de sous maille $\bar{Q}^2 - \bar{Q}^2$. Si bien que comparer les variances obtenues par la simulation numérique et par l'expérience requiert soit de négliger cette contribution soit de la modéliser, celle-ci étant non fermée.

À partir de données expérimentales issues de mesures de la variable d'avancement, notée c , sur une flamme turbulente prémélangée, les auteurs conduisent quelques tests *a priori* considérant que suffisamment d'échelles sont obtenues par les mesures

3. Les auteurs estiment que cette condition, où $L_Q \propto 1/\max(|\nabla \langle Q \rangle|)$, est peu contraignante ici car elle se doit d'être vérifiée en LES afin de résoudre correctement l'écoulement moyen.

expérimentales (ce qui, par analogie, correspond aux données obtenues par la simulation DNS dans notre cas). Ils montrent, sur ce cas particulier, que la moyenne, $\langle \bar{c} \rangle$, n'est que peu influencée par la taille du filtre $\bar{\Delta}$ et que celle-ci se compare aisément à $\langle c \rangle$, en prenant garde que $L_{\langle \rangle} \gg \bar{\Delta}$. Ceci est visible sur la figure 5.11 (à gauche) où sont tracés les profils de $\langle \bar{c} \rangle$ pour quelques tailles de filtre. *A contrario*, la variance, $\langle \bar{c}^2 \rangle - \langle \bar{c} \rangle^2$, est fortement impactée par l'opération de filtrage. Les profils de variance obtenus, graphique de gauche sur la figure 5.11, mettent clairement cet effet en lumière. Globalement, le maximum de la variance $\langle \bar{c}^2 \rangle - \langle \bar{c} \rangle^2$, diminue linéairement avec la taille du filtre $\bar{\Delta}$. Nous avons pu relever le même type de comportement à partir des tests de sous mailles menés sur la simulation DNS d'atomisation. Sur la figure 5.12 les profils, en $z = 5D_0$, de la fraction de volume moyenne $\langle \bar{\Phi} \rangle$ ainsi que l'écart type $\sqrt{\langle \bar{\Phi}^2 \rangle - \langle \bar{\Phi} \rangle^2}$ sont tracés.

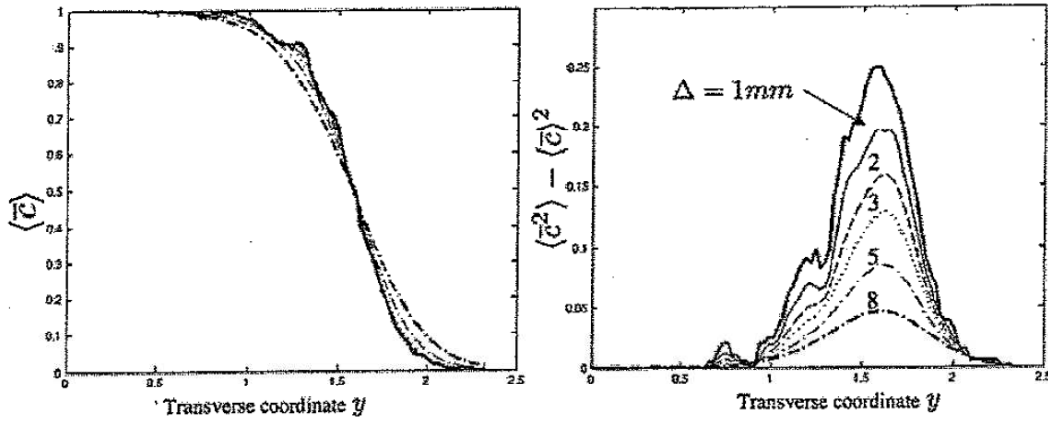


FIGURE 5.11 – Comparaison de la moyenne de variable de progrès résolue $\langle \bar{c} \rangle$ (gauche) et de sa variance $\langle \bar{c}^2 \rangle - \langle \bar{c} \rangle^2$ (droite) pour différentes tailles de filtre, $\bar{\Delta}$, dont les valeurs sont visibles sur le graphique de droite. Les lignes continues en gras correspondent à $\langle c \rangle$ et $\langle c^2 \rangle - \langle c \rangle^2$ à droite et à gauche respectivement. Tests réalisés par Veynante *et al* [132] à partir de données expérimentales issues de mesures sur une flamme turbulente prémélangée.

Deux choix sont alors envisageables pour comparer les statistiques.

- I. On peut tenter de retrouver le niveau de variance comprenant toutes les échelles, $\langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2$, à partir de la LES. Auquel cas, il faut modéliser la variance de sous maille. Pour ce faire, celle-ci peut être estimée à partir d'une équation de bilan. Mais il est possible de l'estimer à partir de relations algébriques :

- Avec un modèle de type gradient :

$$\overline{Q^2} - \bar{Q}^2 \approx C_1 \bar{\Delta} \frac{\partial \bar{Q}}{\partial x_i} \frac{\partial \bar{Q}}{\partial x_i}, \quad (5.7)$$

- ou encore avec une hypothèse de similarité d'échelles :

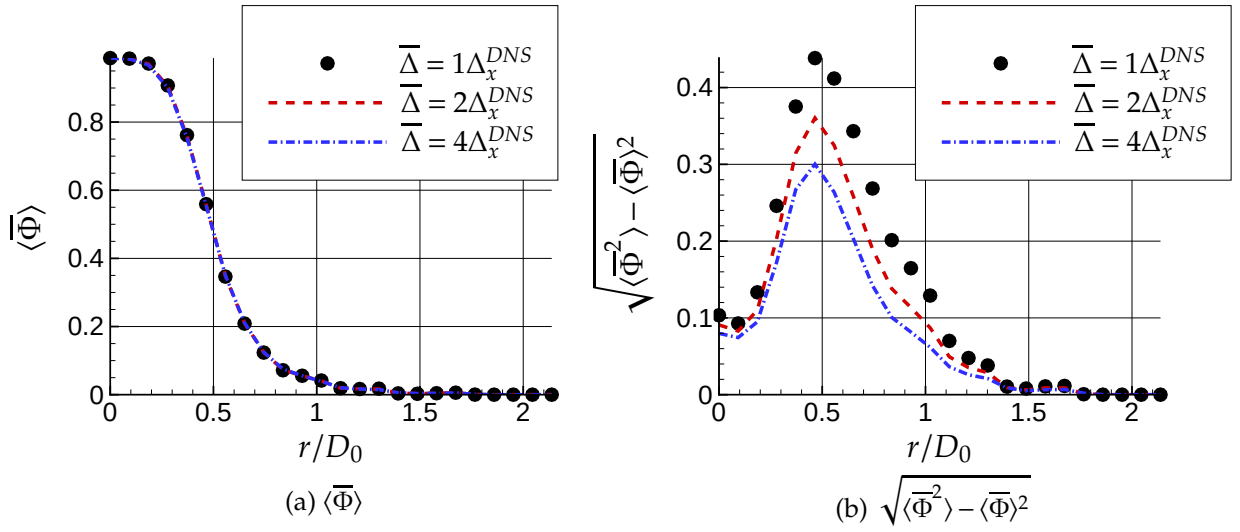


FIGURE 5.12 – Profils radiaux de la moyenne $\langle \bar{\Phi} \rangle$ et de l'écart type, $\sqrt{\langle \bar{\Phi}^2 \rangle - \langle \bar{\Phi} \rangle^2}$, de la fraction de volume, en fonction de la taille du filtre, en $z = 5D_0$. La taille du filtre, $\bar{\Delta}$, est exprimée en fonction de la taille de la maille DNS, Δ_x^{DNS} .

$$\overline{Q^2} - \overline{Q}^2 \simeq c_2(\overline{Q} \widehat{Q} - \widehat{Q} \widehat{Q}) . \quad (5.8)$$

- II.** Une deuxième solution consiste à filtrer les données expérimentales (ou DNS) instantanées et d'appliquer les opérateurs statistiques, moyenne et variance, ensuite. Ce faisant on ne comparera alors que la variance résolue, $\langle \overline{Q}^2 \rangle - \langle \overline{Q} \rangle^2$.

Pour les comparaisons DNS/LES qui seront montrées dans la suite, on décide d'utiliser la solution **II**, principalement parce que l'on ne souhaite pas ajouter une modélisation supplémentaire, contrairement à ce qui est induit par la solution **I**. À cela s'ajoute le fait que, dans notre cas, $\bar{\Delta}/\Delta_x$ est accessible. L'opération de filtrage appliquée aux champs DNS instantanés devrait alors permettre d'estimer la variance aux grandes échelles que l'on pourra alors comparer directement aux résultats des simulations LES.

Le schéma sur la figure 5.13 résume ainsi mise en œuvre du point **II** pour la comparaison des résultats. Considérant les 2 formalismes, pour comparer les statistiques aux échelles résolues, il faut disposer des variables filtrées en chaque instant avec une échelle identique, $\bar{\Delta}$ (rectangle rouge-tirets). En LES, ce filtrage est implicite. En DNS on appliquera un opérateur de filtrage afin d'obtenir ces variables résolues. En pratique ceci est possible dans la mesure où l'on peut disposer de tous les champs instantanés dans les deux formalismes. Il est ainsi possible de détecter les erreurs qui peuvent trouver leurs origines soit dans la modélisation ou encore dans les schémas numériques utilisés

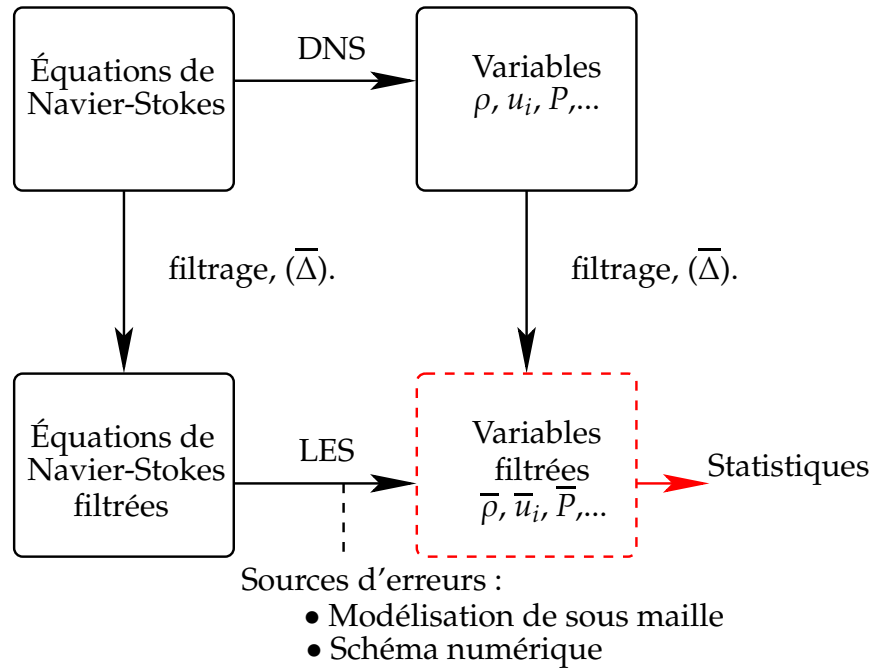


FIGURE 5.13 – Schéma illustrant la méthode utilisée pour la comparaison *a posteriori* DNS/LES.

5.3.1 Aspect pratique

De manière numérique, il faut discrétiser l'opérateur moyenne. On l'écrit alors pour la variable Q :

$$\langle Q \rangle_{i,j,k} = \frac{1}{\sum_{n=1}^{N_{step}} \Delta_t^n} \sum_{n=1}^{N_{step}} \Delta_t^n Q_{i,j,k,t}^n, \quad (5.9)$$

où $Q_{i,j,k}^n$ est la valeur de la variable Q au pas de temps n sur le point de calcul repéré par les coordonnées (i, j, k) . N_{step} est le nombre de pas de temps utilisés pour calculer la moyenne de Q et Δ_t^n le pas de temps à l'étape n . Idéalement, N_{step} doit être suffisamment grand pour obtenir la convergence statistique des moyennes et des écarts types. Néanmoins, en pratique, cette convergence est parfois difficile à atteindre surtout considérant les temps de restitution parfois très long inhérents aux formalismes DNS et LES, dans une moindre mesure.

En effet, on souhaite obtenir les statistiques du jet pleinement développé. Si bien que pour chaque cas testé les calculs des statistiques commencent, au temps t_d , une fois que le jet atteint la fin du domaine, en $z \sim 24D_0$. Ce temps t_d correspond alors à t_1 dans la formulation continue de la moyenne temporelle, équation 5.4. Les statistiques sont effectuées sur un temps équivalent au temps de parcours du jet sur toute la longueur du domaine, à l'instar celles obtenues par Ménard [90] dans ses travaux de thèse. Il semble que ce temps soit un bon compromis entre temps de restitution et convergence. Celui-ci correspond alors en DNS pour un maillage de $128 \times 128 \times 1024$ à 10 000 pas de temps avec $\Delta_t \approx 2.5 \times 10^{-9}s$.

De plus, on applique un opérateur de moyenne radiale, entre r et $r + dr$ avec $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, sur les statistiques obtenues, $\langle Q \rangle$ et $S_{Dev}(Q)$. Les statistiques pour un rayon donné étant sensiblement les mêmes, cette opération de moyenne radiale permet donc de résumer les informations des deux directions x et y selon la direction radiale, r , tout en augmentant de manière significative la convergence statistique dans cette même direction. Notons tout de même qu'au centre du jet dans la direction axiale, z , la convergence est plus difficile à atteindre dans la mesure où moins de points de calculs sont disponibles pour le calcul de la moyenne radiale. Cette opération n'influe pas sur les niveaux moyens et d'écart types dans la mesure où celle-ci est appliquée une fois les statistiques obtenues, pour une échelle correspondante à $\bar{\Delta}$. Ce point a été préalablement vérifié. On confondra alors les notations pour $\langle \rangle$ et $S_{Dev}()$ moyennées radialement avec leurs notations originales.

Au final, pour la variable Q , on tracera donc les profils de moyenne et d'écart type à 5, 10 et 20 diamètres (soit $z/D_0 = 5, 10$ et 20) et le long de l'axe du jet (direction z) en son centre (soit $z/D_0 = 0$) comme cela est illustré sur la figure 5.1.

5.3.2 Pénétration et dispersion moyenne de liquide

Dans cette section on s'intéresse à la dispersion moyenne du liquide. Les profils moyens de champs de fraction de volume et de vitesses résolues sont donc tracés ici ainsi que leurs écarts types. On rappelle que l'on compare le modèle LES, développé durant cette thèse, avec la modélisation standard, notée « LES/VOF », les profils DNS servent alors de référence.

Pour chaque figure, les profils DNS sont tracés avec des points (●), le modèle LES en traits continus (—) et LES/VOF en traits pointillés (---)⁴. Les maillages testés seront systématiquement indiqués dans la légende.

5.3.2.1 Profils moyens et écarts types de fraction de volume résolues

Sur les figures 5.14 et 5.15 les profils de fraction de volume résolus moyens sont tracés pour les différents formalismes testés pour des maillages $32 \times 32 \times 256$ et $64 \times 64 \times 512$ respectivement. Pour les comparaisons, les données DNS sont alors filtrées avec $\bar{\Delta} = 4\Delta_x^{DNS}$ pour le premier maillage et $\bar{\Delta} = 2\Delta_x^{DNS}$ pour le second.

Il est possible d'observer sur les profils axiaux, figures 5.14(a) et 5.15(a), que la fraction de volume moyenne dans le cas LES/VOF pénètre beaucoup plus que pour le formalisme DNS. Cet effet, imputable à la méthode de suivi d'interface, avait déjà été mis en lumière au chapitre précédent (c.f. section 4.1.1). En outre, si on se réfère par exemple à la longueur où $\langle \bar{\Phi} \rangle = 0.5$, on observe bien que le cas 32LES/VOF à une longueur de pénétration moyenne supérieure au cas 64LES/VOF, ceci rejoint les résultats obtenus sur la figure 4.5(b).

De plus, on définit la zone du cœur intacte de liquide comme la zone attachée à l'injecteur et où $\langle \bar{\Phi} \rangle > 0.99$, comme proposé par Leboissetier *et al* [69]. Dans cette zone,

4. Remarquons que d'une manière générale cette nomenclature sera utilisée dans tous les graphiques qui vont suivre, sauf mention contraire.

où ces deux conditions sont respectées, cela indique alors une présence de liquide quasi « permanente », ou, exprimé en d'autres termes, que la probabilité de trouver du liquide dans cette zone, à un instant t , avoisine une valeur unitaire. On alors peut observer que, pour ces deux derniers cas, la longueur intacte, L_{BU} , de liquide est plus grande que sur le cas DNS. Sur ce dernier, elle vaut environ, $L_{BU} \sim 6D_0$, alors que pour le cas 32LES/VOF, $L_{BU} \sim 8D_0$ et pour 64LES/VOF on mesure $L_{BU} \sim 7D_0$.

Une fois de plus, ces profils axiaux montrent une limitation claire de la méthode LES/VOF appliquée au jet, considérant que les résultats moyens sont extrêmement sensibles au maillage utilisé.

De son côté, le modèle LES d'atomisation proposé permet de bien décrire le niveau moyen de fraction de volume obtenu sur le cas de référence. Et ce, à la fois pour le cas 64LESmod, figure 5.15(a), mais également avec une taille de maille supérieure, cas 32LESmod figure 5.14(a). On remarque tout de même que dans les deux cas la longueur de liquide intacte est inférieure au cas DNS, avec une valeur de $l_{BU} \sim 4D_0$. Ce fait peut trouver deux origines distinctes :

- Premièrement, il est possible que la diffusion numérique joue un rôle important, surtout considérant le fait qu'un schéma WENO 5 est utilisé pour le transport de la fraction de volume résolue, $\overline{\Phi}$. Cette classe de schémas, « robustes », sont en effet connus pour être dissipatifs près des zones de forts gradients.
- Deuxièmement, la modélisation utilisée peut également influencer ici sur la pénétration moyenne de liquide. Par exemple, le choix de la constante, C_Φ , utilisée pour modéliser, $\tau_{\Phi,i}$, le terme de sous maille de la fraction de volume résolue, peut se révéler important, dans la mesure où ce terme de sous maille doit également se comporter comme un terme dispersif. Or, la valeur choisie pour cette constante est basée sur les tests de sous maille conduits au chapitre 3. Outre le fait que ces tests soient basés sur des champs instantanés, les résultats ont montré que la valeur de C_Φ est globalement dépendante du rapport $\widehat{\Delta}/\overline{\Delta}$, la taille du filtre test sur la taille du filtre LES.

Ajoutons que les contributions relatives de ces deux processus (numérique et modélisation) au phénomène de diffusion peuvent également être influencés par la taille de la maille. En effet, l'influence de la diffusion numérique peut être beaucoup plus importante que la modélisation sur le cas 64LESmod, alors qu'il est possible que la situation soit inversée sur le cas 32LESmod, étant donné que dans pour ce dernier la contribution de sous maille est théoriquement plus importante. D'un point de vue pratique il est difficile de clairement déterminer l'influence respective de la modélisation et du schéma numérique, ce point reste à déterminer. Néanmoins on s'intéressera à l'aspect numérique dans la suite.

Les profils radiaux, figures 5.14 et 5.15 (en (b), (c) et (d)), montrent que le modèle LES/VOF tend à globalement surestimer la fraction de volume par rapport au cas DNS, ceci est surtout visible en $z = 10D_0$. On note, à l'instar des profils axiaux, que le niveau moyen de fraction de volume résolue est plus important pour le cas 32LES/VOF (figure 5.14(c)) que pour le cas 64LES/VOF (figure 5.15(c)).

Pour les cas 64LESmod et 32LESmod les profils radiaux montrent une amélioration notable par rapport au deux cas précédent. Une surestimation de $\langle \overline{\Phi} \rangle$ est également

visible en $z = 10D_0$. Cependant, celle-ci est moins importante que pour les formalismes LES/VOF et surtout elle paraît ne pas dépendre du maillage utilisé. On relève globalement des niveaux identiques⁵ sur ce profil, en comparant le cas 32LESmod (figure 5.14(c)) et 64LESmod (figure 5.15(c)).

On peut souligner ici que l'étude de quelques champs DNS instantanés montre que, pour cette configuration, la zone aux alentours de $z = 10D_0$ constitue une zone intense d'atomisation. C'est, en outre, hormis la zone de cisaillement proche injecteur, un des endroits où les premières structures liquides, où « blobs » commencent à se détacher du cœur liquide connexe. Cette zone est alors le siège d'importantes fluctuations de vitesse et de fraction de volume. Ainsi, l'étude des écarts types proposée est importante car, même si modèle LES semble à même de globalement reproduire les niveaux moyens de fraction de volume obtenus avec le formalisme DNS, il est souhaitable que celui-ci reproduise également les bons niveaux de fluctuations aux échelles résolues, surtout dans cette zone. C'est ce que l'on propose d'étudier dans la suite.

Ainsi, les profils d'écarts types aux échelles résolues, $S_{Dev}(\bar{\Phi})$, sont tracés sur les figures 5.16 et 5.17. En premier lieu, on décrit le comportement des profils axiaux et radiaux en DNS. En observant les profils axiaux (en (a) sur ces deux figures), on peut constater que la fraction de volume résolue subit peu de fluctuations jusqu'à environ $z = 5D_0$, le niveau d'écart type est alors faible. Ensuite, on note que ce niveau augmente rapidement pour atteindre un maximum en $z \sim 8D_0$, correspondant à la zone évoquée plus haut, où l'arrachement des « blobs » liquides est initié. Enfin ce niveau diminue progressivement à mesure que l'on s'éloigne de l'injecteur.

Pour les profils radiaux, en $z = 5D_0$ figures 5.16(b) et 5.17(b), on observe un pic de l'écart type situé à environ $r = 0.5D_0$. À cet endroit il existe un fort cisaillement de vitesse, comme on l'a vu sur les tests *a priori* au chapitre 3. L'interface est alors très déformée et des gouttes sont arrachées à celle-ci, expliquant les profils que l'on peut relever ici. Plus loin, en $z = 10D_0$ et $z = 20D_0$, les profils de $S_{Dev}(\bar{\Phi})$ sont plus étalés, l'écoulement moyen étant alors moins cisailé.

Sur ces profils axiaux, les deux modélisations LES testées présentent globalement un comportement identique de l'écart type, $S_{Dev}(\Phi)$ par rapport à la DNS. Néanmoins, quelques différences sont à mettre en lumière. D'une part, on remarque pour les cas 32LES/VOF et 64LES/VOF que les profils axiaux présentent un décalage avec les résultats DNS, l'augmentation de $S_{Dev}(\bar{\Phi})$ intervenant plus loin qu'en DNS. Il en va de même pour la localisation des maximums. Il est même difficile de clairement observer un pic pour le cas 32LES/VOF. On peut supposer que ce comportement décalé par rapport à la DNS est une fois de plus relié au fait que la longueur de rupture de la colonne liquide, L_{BU} , est plus grande que dans le cas DNS, décalant d'autant les profils d'écart type. On rappelle, concernant ce point, les résultats visibles sur la figure 4.4.

D'autre part, toujours pour les cas 32LES/VOF et 64LES/VOF, les niveaux de $S_{Dev}(\bar{\Phi})$ sont globalement surestimés par rapport à ceux obtenus avec le formalisme DNS. Ici, on peut supposer que l'origine de ce phénomène est imputable à l'utilisation de la méthode VOF. Comme cela a déjà été évoqué celle-ci empêche, par construction, de décrire des

5. On rappelle que, même si ces deux courbes n'ont pas le même niveau de filtrage, celles-ci sont vraisemblablement comparables considérant les remarques de la section précédente.

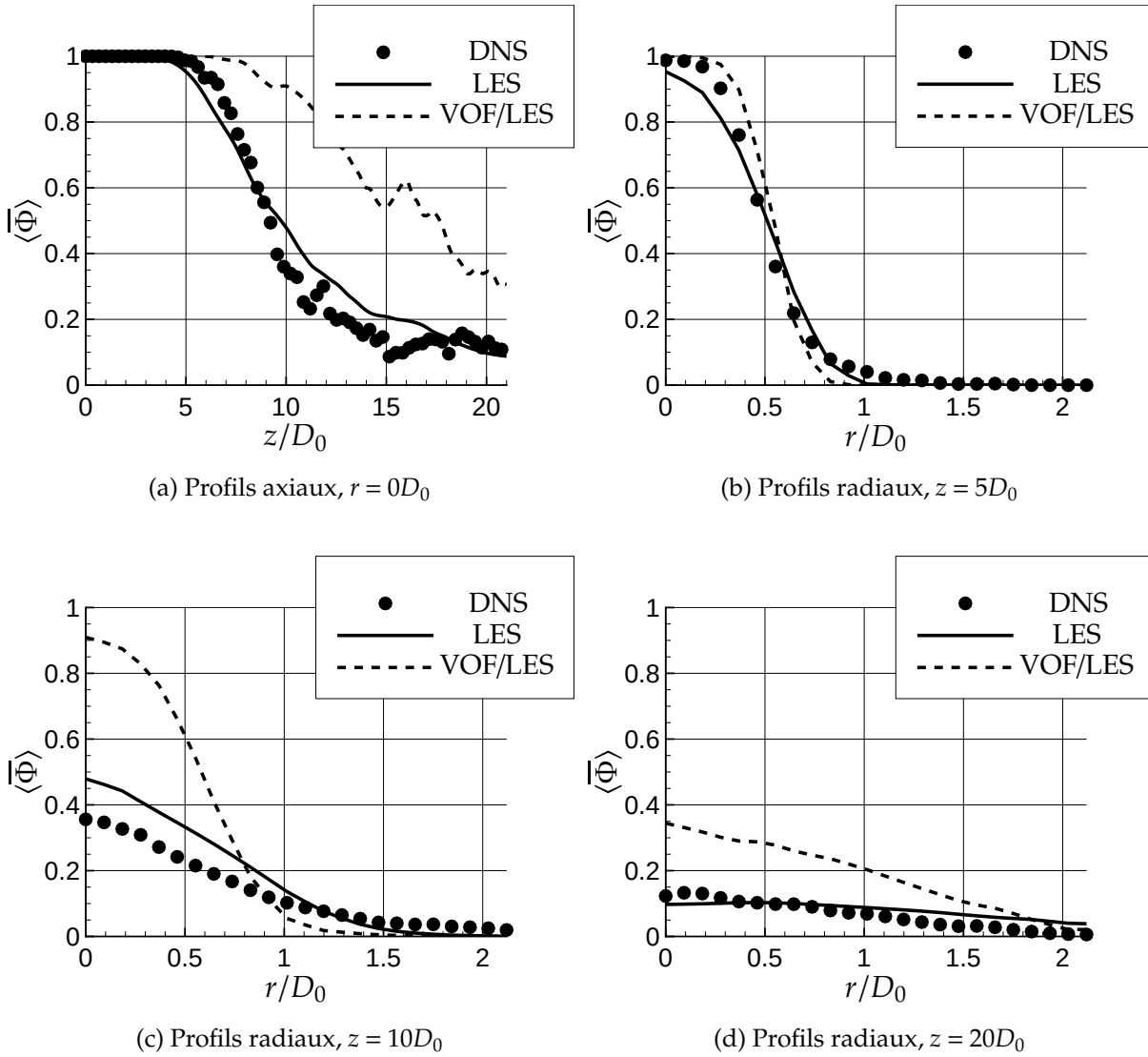


FIGURE 5.14 – Profils de la fraction de volume moyenne. Cas $32^2 \times 256$.

structures de dimensions inférieures à la taille de la maille LES, bloquant la dispersion moyenne du spray aux échelles résolues, de l'ordre de $\bar{\Delta}$. On peut d'ailleurs remarquer que les profils axiaux, figures 5.16(a) et 5.17(a), montrent que le cas 32LES/VOF présente un niveau maximal de $S_{Dev}(\bar{\Phi})$ environ 30% plus élevé que celui relevé en DNS, alors que pour le cas 64LES/VOF cette différence est moins importante, plus d'échelles étant résolues.

Concernant le modèle LES d'atomisation en 32LESmod et 64LESmod, on remarque sur les profils axiaux, que l'augmentation de $S_{Dev}(\bar{\Phi})$ est obtenue quasiment au même endroit qu'en DNS ($z \sim 5D_0$). Les positions des pics sont également bien capturées. Pour ce modèle, le spray de sous maille est pris en compte, contrairement au modèle LES/VOF. Néanmoins, les niveaux d'écart type restent dans les deux cas inférieurs à ceux obtenus en DNS. Ce fait a tendance à confirmer l'hypothèse, émise lors de

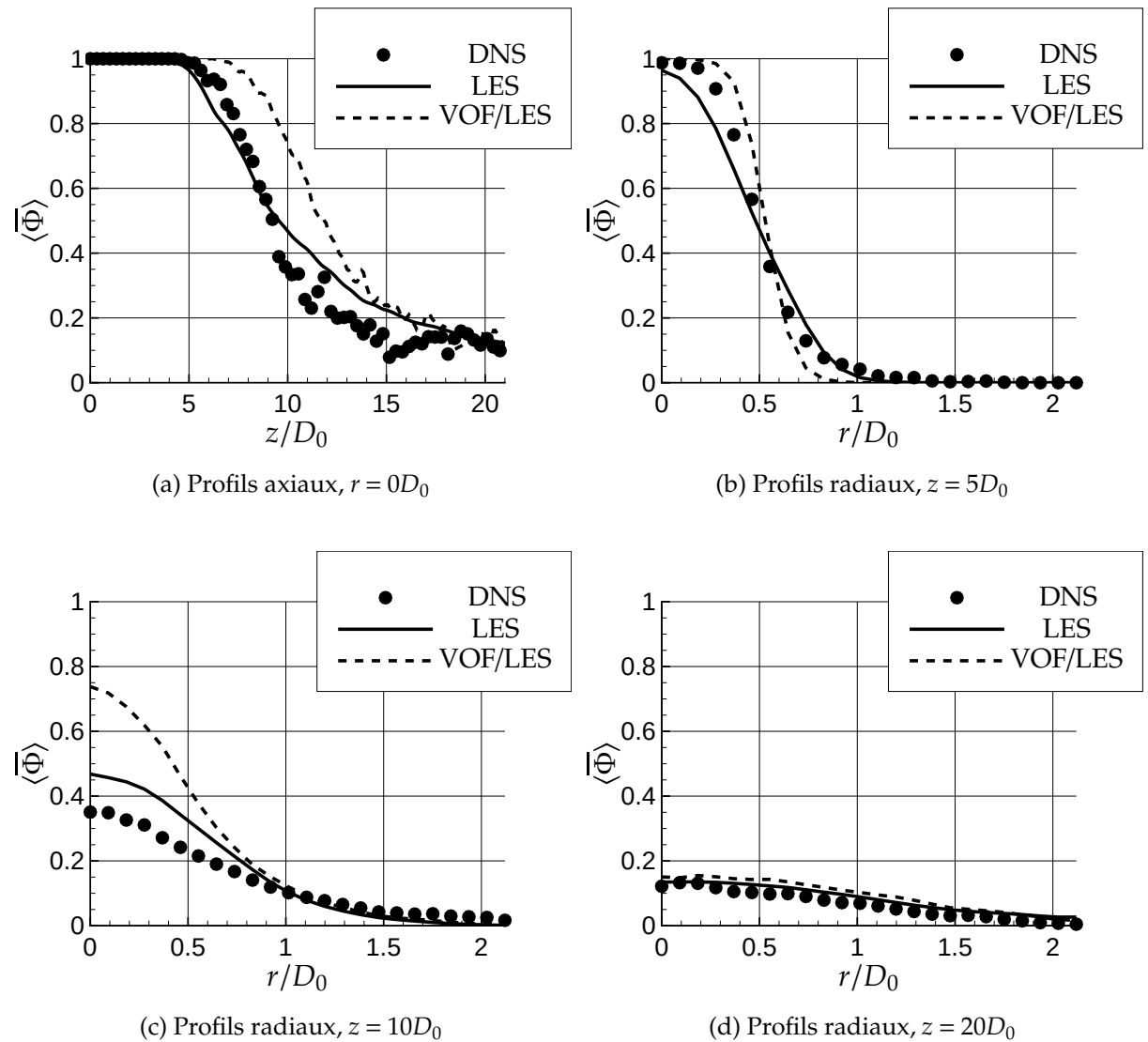


FIGURE 5.15 – Profils de la fraction de volume moyenne. Cas $64^2 \times 512$.

l'étude des moyennes, d'une diffusion importante soit due au schéma de transport de la fraction de volume ou encore à la modélisation du terme de sous maille de la fraction de volume résolue, τ_{Φ_i} . On peut également remarquer que le cas 32LESmod se compare mieux à la DNS que le cas 64LESmod. Il est possible que la diffusion numérique soit prépondérante sur ce dernier cas.

Pour les profils radiaux, figures 5.16 et 5.17 (b), (c) et (d), les modèles montrent également des différences notables. Sur les profils en $z = 5D_0$ le modèle LES/VOF permet de capter un niveau d'écart type comparable au cas DNS, à la fois en 32LES/VOF et 64LES/VOF, contrairement aux profils obtenus grâce au modèle LES, à la fois pour les cas 32LESmod et 64LESmod, où les niveaux sont inférieurs à l'instar des profils axiaux. Cependant, on peut noter que la largeur du pic, qui ici correspond globalement à l'épaisseur de la couche de cisaillement, est mieux capté avec cette dernière méthodologie. En $z = 10D_0$, figures 5.16(c) et 5.17(c), les cas LES/VOF montrent des pro-

files radiaux qui laissent penser que l'interface est encore dans une zone de cisaillement de vitesse, ce qui paraît cohérent avec le fait que la rupture du jet intervient plus loin dans ces deux cas. Les deux cas LESmod présentent des profils qui se comparent mieux au cas DNS. On relève une fois de plus que le niveau d'écart type pour le cas 64LESmod reste moins bon que le cas 32LESmod. Les résultats sont sensiblement similaires en $z = 20D_0$ pour les 2 modèles testés.

Au final, l'étude des différents profils axiaux et radiaux permettent de conclure ici que le modèle d'atomisation proposé dans ce mémoire permet de mieux représenter la dispersion et la pénétration du liquide qu'un modèle de type LES/VOF. Et ce aussi bien en terme de moyenne que d'écart type. En outre, il est important de souligner que la dépendance au maillage semble relativement faible.

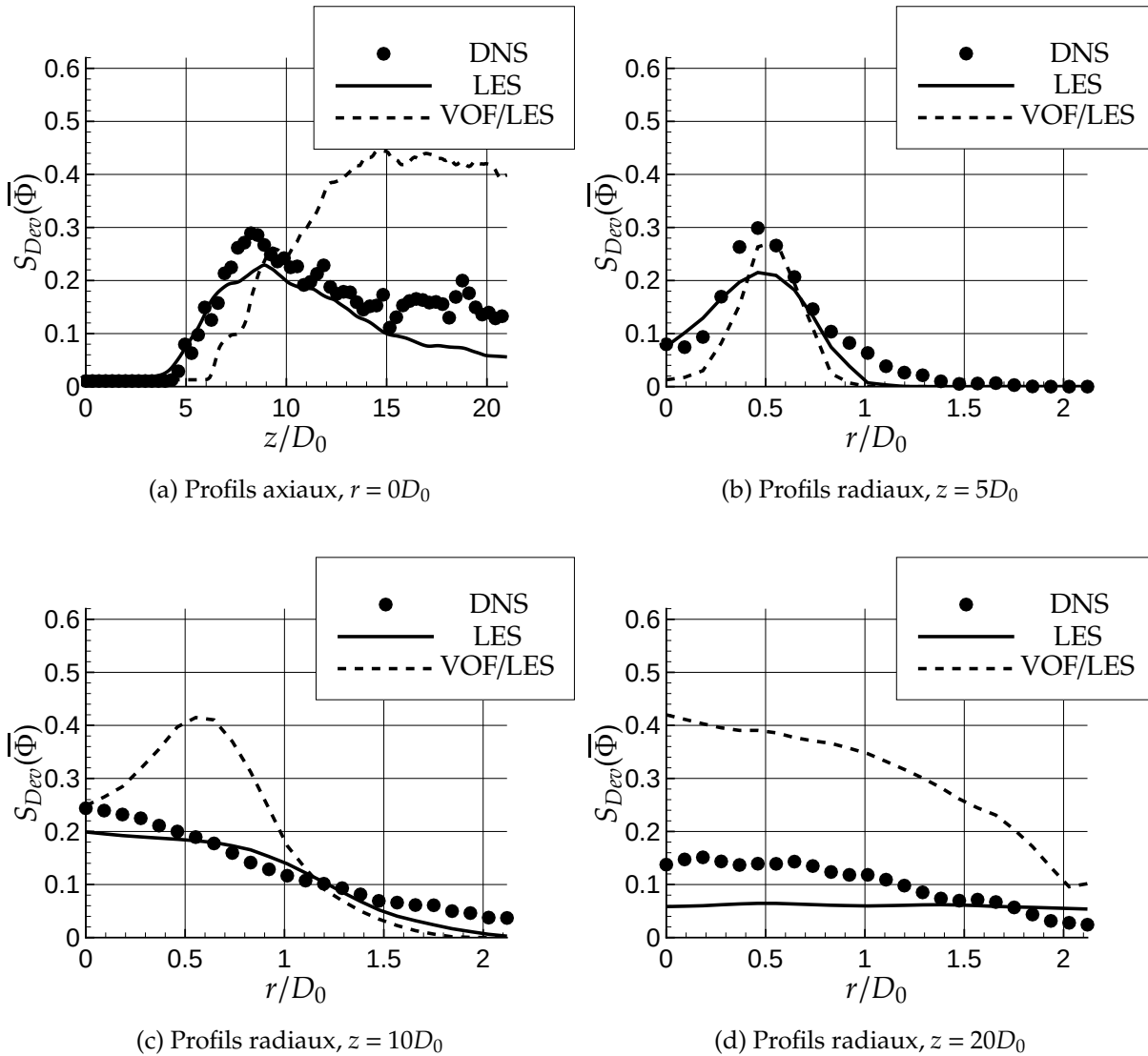


FIGURE 5.16 – Profils d'écarts types de la fraction de volume. Cas $32^2 \times 256$.

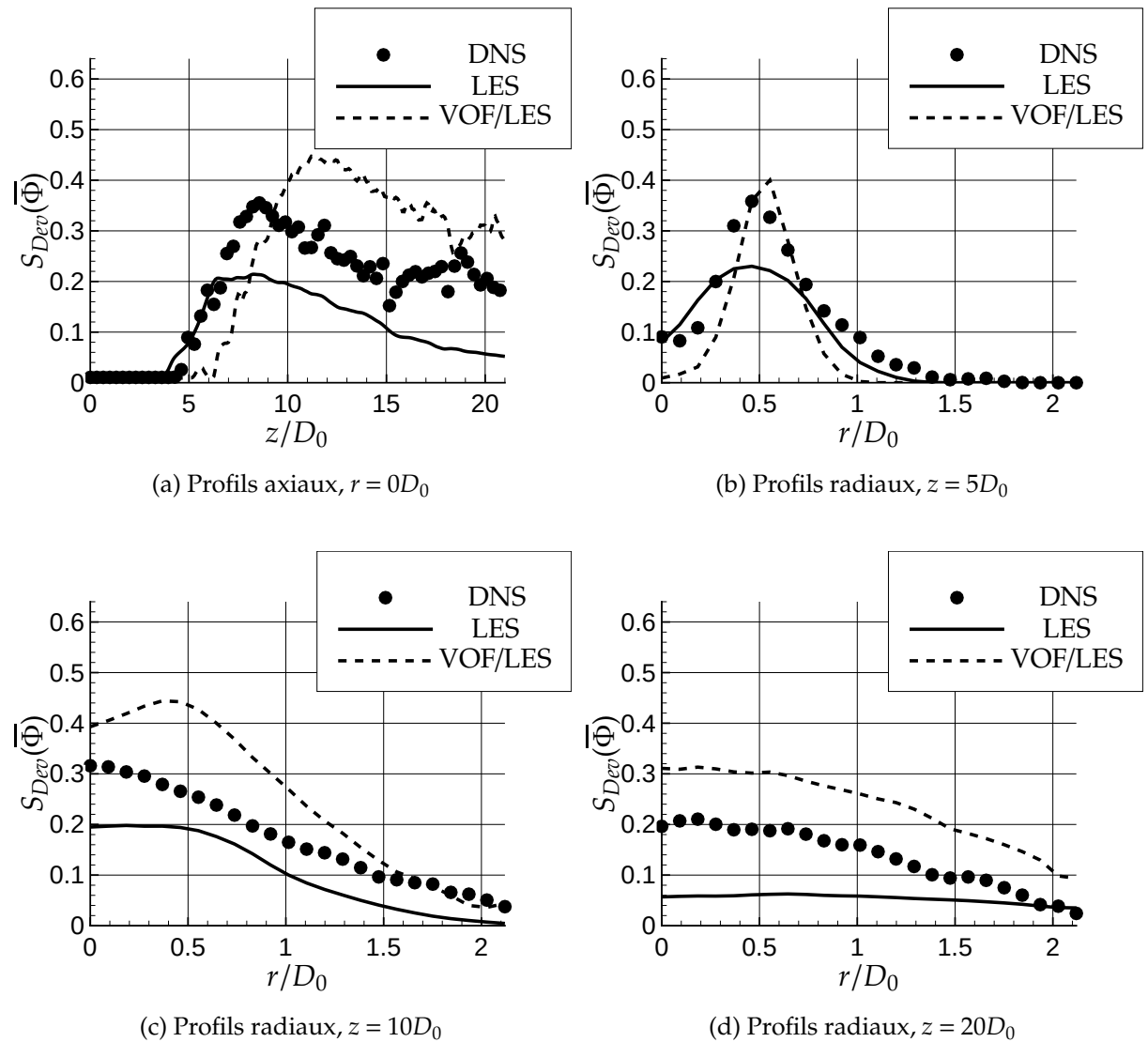


FIGURE 5.17 – Profils d'écarts types de la fraction de volume. Cas $64^2 \times 512$.

5.3.2.2 Angle de Spray et longueur de rupture, L_{BU}

Il est possible, à partir des champs moyens, de comparer l'angle de spray et la longueur de rupture, L_{BU} , pour les différents cas testés. Pour ces 2 paramètres, on se base sur les critères définis par Leboissetier *et al* [69].

Le demi angle du spray, $\theta/2$, est alors défini par l'angle réalisé par l'iso-ligne $\langle \bar{\Phi} \rangle = 0.01$ avec l'axe du jet. La longueur intacte de liquide ou longueur de rupture, L_{BU} , correspond à la coordonnée maximale dans la direction de l'écoulement (z) de l'iso-ligne $\langle \bar{\Phi} \rangle = 0.99$.

Les figures 5.18 et 5.19 présentent ainsi les angles de spray et les longueurs L_{BU} obtenus pour les maillages de $32^2 \times 256$ et $64^2 \times 512$, respectivement. Chacune de ces figures (a) montre les résultats obtenus pour la DNS filtrée, (b) avec le modèle d'atomisation et (c) avec la méthodologie LES/VOF. Précisons que sur ces 2 figures l'angle,

$\theta/2$, a d'abord été estimé pour le modèle LES d'atomisation grâce à la ligne pointillée rouge, en (b). Cette ligne a alors été fidèlement reportée sur les 2 autres cas (*i.e.* (a) et (c)) à des fins de comparaison.

Concernant la longueur de rupture, L_{BU} , dont la limite est symbolisée par les traits pointillés bleus sur ces différentes figures, les conclusions sont identiques à celles obtenues sur les profils axiaux. Néanmoins, ces figures permettent d'observer clairement une illustration de l'impact des différentes modélisations sur la longueur de rupture, L_{BU} .

Avec le modèle LES d'atomisation, on relève un angle de spray d'environ 17.5° , et ce pour les deux maillages testés, 32LESmod et 64LESmod. On remarque pour les cas DNS que cet angle paraît légèrement supérieur, on peut l'estimer au-delà de 18° . Le modèle LES/VOF montre, quant à lui, un angle légèrement inférieur pour le cas 32LES/VOF mais rejoint une valeur sensiblement identique au modèle LESmod pour le maillage $64^2 \times 512$.

Il est important de noter qu'il est difficile d'apprécier un angle sur tous ces cas⁶, d'autant que l'iso- $\langle\Phi\rangle = 0.01$ présente une courbure pour les cas LES/VOF que l'on ne détecte pas avec les cas LESmod. Cependant, on peut tout de même relever, concernant cet angle θ , que le modèle LESmod semble moins sensible au maillage utilisé que le modèle LES/VOF.

D'un point de vue théorique, Reitz *et al* [106] ont proposé la formulation suivante pour l'angle de spray, θ :

$$\tan\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{1}{A} 4\pi \sqrt{\frac{\rho_g}{\rho_l}} f(T) , \quad (5.10)$$

où A est une constante déduite expérimentalement qui dépend de L_{inj}/D_0 , le rapport de la longueur de l'injecteur sur son diamètre. Les auteurs l'estiment comme :

$$A = 3 + \frac{L/D}{3.6} . \quad (5.11)$$

L'expression analytique de f dans l'équation 5.10, issue des études d'instabilités, dépend de la constante T qui est fonction des conditions d'injection, telle que :

$$T = \frac{\rho_l}{\rho_g} \left(\frac{Re_l}{We_l} \right)^2 . \quad (5.12)$$

Dans leurs travaux de thèse respectifs, utilisant le formalisme DNS, Leboissetier [68] puis Ménard [90] utilisent l'approche théorique de Reitz *et al* [106] afin de comparer les angles de sprays obtenus.

Si on fixe, à l'instar de ces deux derniers auteurs, le rapport $L_{inj}/D_0 = 4$, on peut alors estimer la valeur théorique de l'angle θ pour les conditions d'injections présentées sur le tableau 5.1. $f(T)$ étant relevée dans les travaux de Reitz *et al* [106], on trouve une valeur théorique l'angle de spray de $\theta_{th} = 19.2^\circ$. Ainsi, la valeur que l'on relève avec le modèle LES est relativement proche de ce résultat théorique.

6. C'est d'ailleurs pour cette raison que l'on conserve le même angle issu du modèle LES d'atomisation sur ces comparaisons.

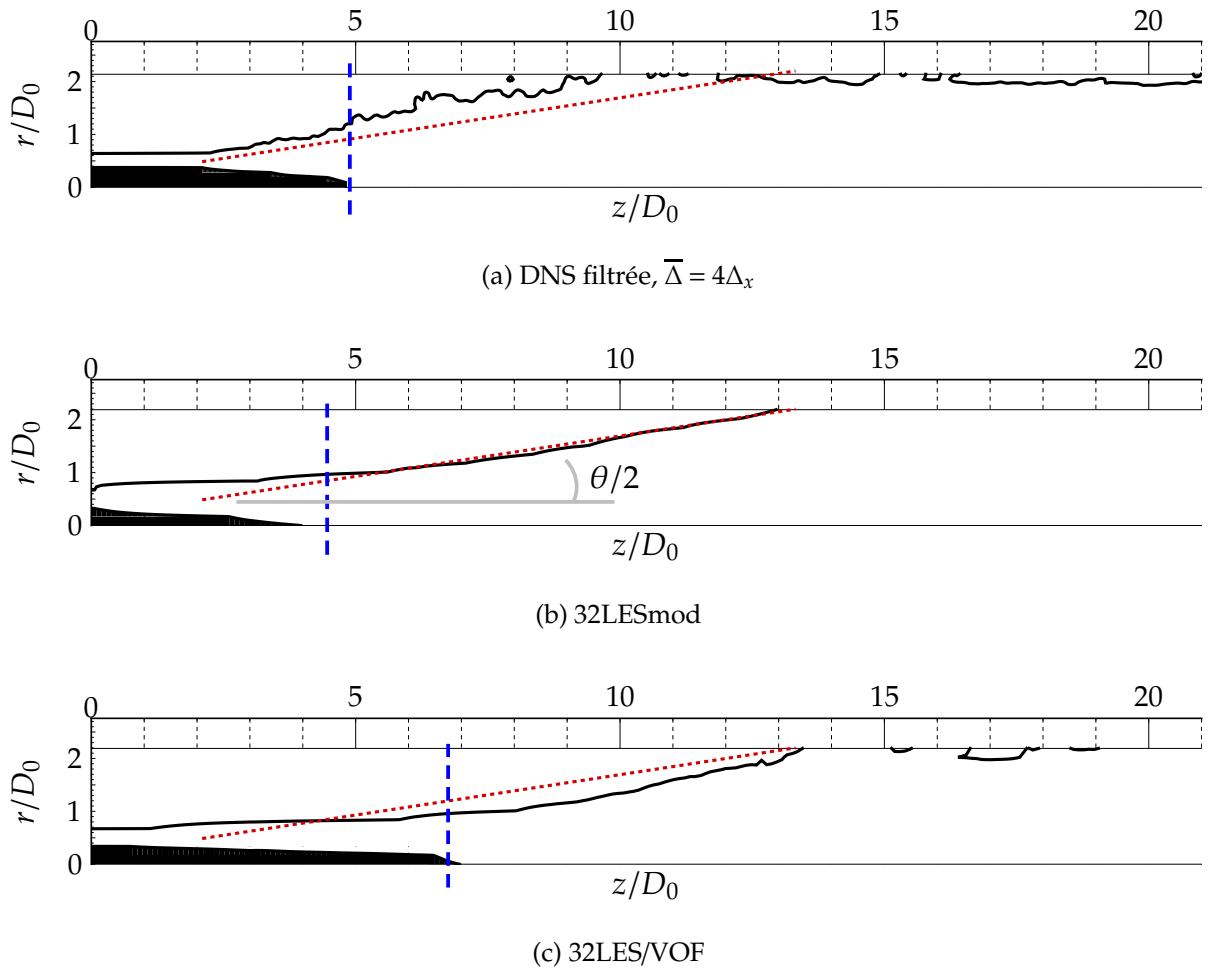
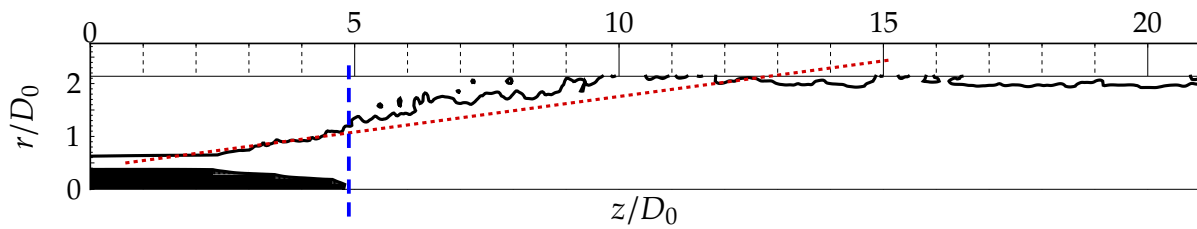
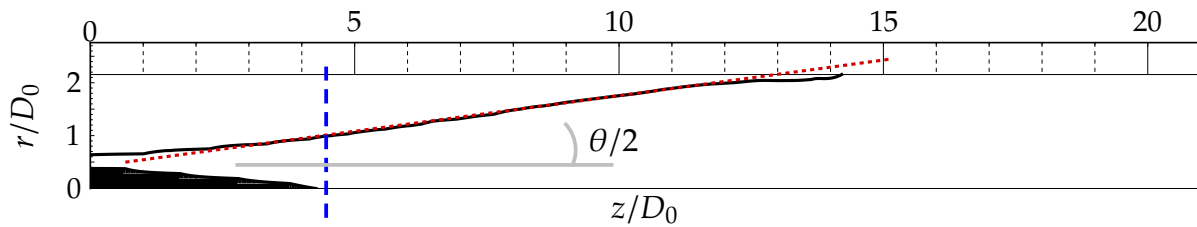
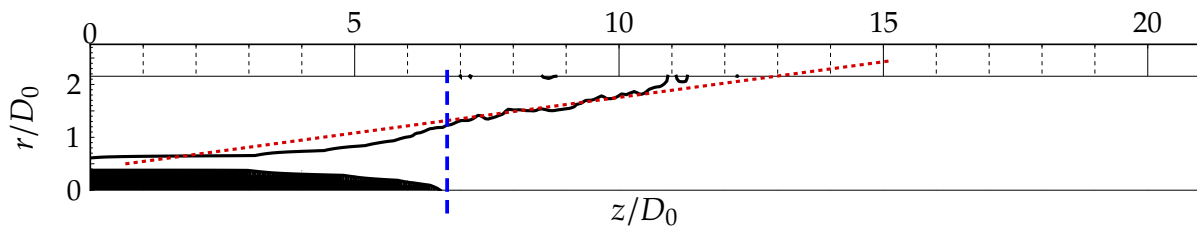


FIGURE 5.18 – Angle de spray estimé (ligne pointillée) à partir de l’isoligne $\langle \bar{\Phi} \rangle = 0.01$ (en noire) de fraction de volume avec le modèle 32LESmod (b), la courbe pointillée est alors reportée sur le cas DNS (a) et 32LES/VOF (c). La longueur de pénétration est estimée à partir de l’iso- $\langle \bar{\Phi} \rangle = 0.99$ (contenant la surface noire) au niveau de l’indicateur tracé en bleu.

(a) DNS filtrée, $\bar{\Delta} = 2\Delta_x$ 

(b) 64LESmod



(c) 64LES/VOF

FIGURE 5.19 – Angle de spray estimé (ligne pointillée) à partir de l'isoligne $\langle \bar{\Phi} \rangle = 0.01$ (en noire) de fraction de volume avec le modèle 64LESmod (b), la courbe pointillée est alors reportée sur les cas DNS filtrée (a) et 64LES/VOF (c). La longueur de pénétration est estimée à partir de l'iso- $\langle \bar{\Phi} \rangle = 0.99$ (contenant la surface noire) au niveau de l'indicateur tracé en bleu.

En pratique, pour effectuer une comparaison plus précise avec la relation théorique 5.10, il faudrait réaliser beaucoup de cas de calculs en faisant varier les différents paramètres des simulations (rapport des masses volumiques, des viscosités, vitesse d'injection, *etc*). Tout ces tests sont envisageables mais n'ont pu être réalisés au cours des présents travaux de thèse. Cependant, on propose tout de même de comparer les angles théoriques avec ceux obtenus par le modèle LESmod sur deux cas où l'on fait varier uniquement la vitesse d'injection V_{inj} . La figure 5.20 présente ainsi l'angle de spray, θ et la longueur, L_{BU} , pour deux vitesses d'injections, avec en (a) $V_{inj} = 200m.s^{-1}$ et en (b) $V_{inj} = 400m.s^{-1}$. On ne montre ici que les résultats obtenus pour le maillage $64^2 \times 512$, le cas $32^2 \times 256$ menant sensiblement aux mêmes conclusions.

On remarque que, malgré une vitesse d'injection allant du simple au double, les moyennes, $\langle \bar{\Phi} \rangle$ sont très similaires sur ces deux cas. Il est même à souligner qu'il y a peu de différences en comparant avec la figure 5.19(b) où la vitesse d'injection est encore moindre, $V_{inj} = 100m.s^{-1}$. En outre, la longueur de cœur liquide varie peu, soulignons que celle-ci diminue légèrement avec $V_{inj} = 400m.s^{-1}$. Par contre, l'angle de spray relevé pour les deux cas de la figure 5.20 est inférieur au cas $V_{inj} = 100m.s^{-1}$. Celui-ci est néanmoins identique pour $V_{inj} = 200m.s^{-1}$ et $V_{inj} = 400m.s^{-1}$, on l'estime alors à $\theta \simeq 15.7^\circ$.

La relation 5.10, de son côté, permet d'estimer angle de spray pour le cas $V_{inj} = 200m.s^{-1}$ à $\theta_{thV200} = 17.4^\circ$ et pour $V_{inj} = 400m.s^{-1}$ à $\theta_{thV400} = 16.6^\circ$. On note donc que les angles obtenus par le modèle LES sont proches de ces valeurs théoriques et surtout que ceux-ci présentent un comportement similaire au modèle théorique de Reitz *et al* [106], à savoir que l'angle de spray diminue avec la vitesse d'injection.

Au final, soulignons qu'il peut être étonnant, au premier abord, de relever des angles et des longueurs de cœurs liquides quasi-similaires malgré l'augmentation de la vitesse d'injection. Mais ceci paraît cohérent avec le fait que l'on se situe à haut nombre de Reynolds et de Weber. Il est alors possible, pour des régimes où ces nombres sont infinis, que l'angle de spray deviennent indépendants de la vitesse d'injection. D'ailleurs, Siebers [117] donne une corrélation expérimentale pour l'angle de spray, θ , dans le cas de sprays Diesel, qui s'exprime :

$$\tan\left(\frac{\theta}{2}\right) = C \left[\left(\frac{\rho_l}{\rho_g} \right)^{0.19} - 0.0043 \sqrt{\frac{\rho_g}{\rho_l}} \right]. \quad (5.13)$$

On remarque que dans cette dernière relation l'angle de spray est seulement dépendant du rapport des masses volumiques liquide/gaz. En appliquant cette relation pour notre cas on trouve alors un angle de $\theta = 15^\circ$. Il est alors intéressant de constater que le modèle permet de rejoindre cette limite.

5.3.2.3 Profils moyens et écarts types de la vitesse axiale résolue

On présente ici les différents profils axiaux et radiaux, de moyenne et d'écart type, obtenus pour la vitesse axiale résolue $\bar{u}_3$. On précise que la vitesse d'injection est de nouveau, $V_{inj} = 100m.s^{-1}$.

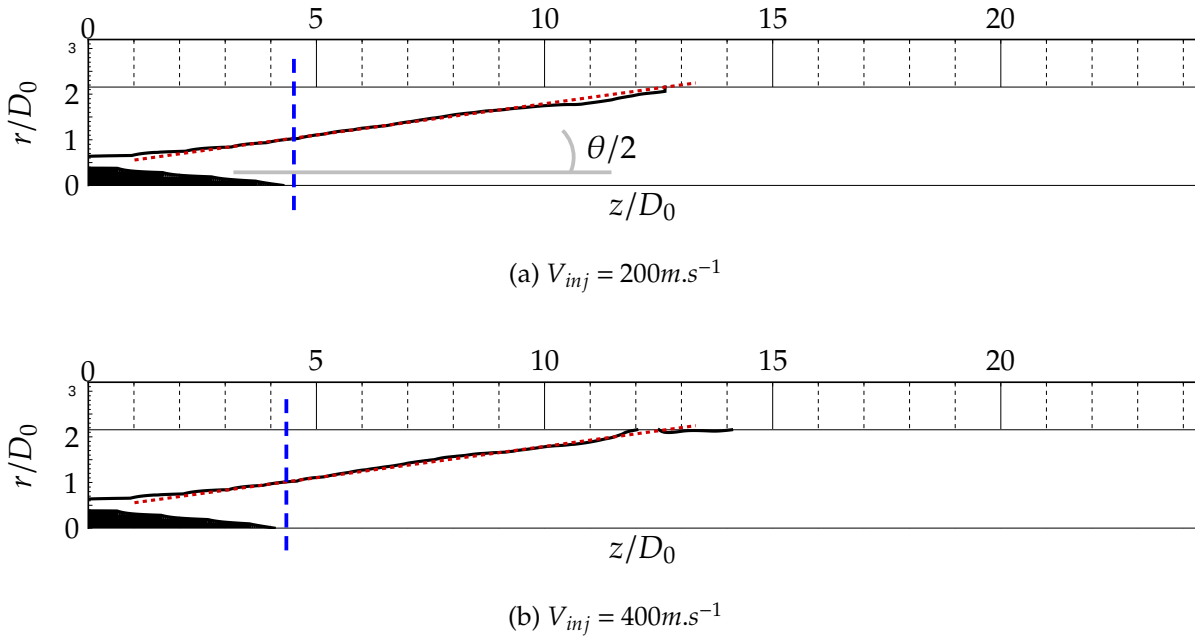


FIGURE 5.20 – Influence de la vitesse d'injection, V_{inj} , sur l'angle de spray et la longueur du cœur liquide, avec le modèle LES d'atomisation. Maillage : $64^2 \times 512$. Ces grandeurs sont estimées de manière identique que sur les figures précédentes. (a) $V_{inj} = 200 \text{ m.s}^{-1}$ et (b) $V_{inj} = 400 \text{ m.s}^{-1}$.

Les profils moyens, $\langle \bar{u}_3 \rangle$, sont visibles sur les figures 5.21 et 5.22 pour les maillages $32^2 \times 256$ et $64^2 \times 512$ respectivement. Et $S_{Dev}(\bar{u}_3)$ sur les figures 5.23 et 5.24 pour les mêmes maillages. A l'instar des profils présentés pour la fraction de volume résolue, les résultats du modèle LES d'atomisation seront comparés aux résultats DNS et à ceux du modèle LES/VOF.

L'observation des différents profils moyens, figures 5.21 et 5.22 montre ainsi un comportement et des valeurs très proches pour les deux modélisations LES. Les profils moyens, $\langle \bar{u}_3 \rangle$, montrent globalement un comportement correct par rapport aux résultats DNS. Les résultats pour le maillage $64^2 \times 512$, figure 5.22, semblent toutefois plus proches de la DNS, à la fois pour le modèle 64LES/VOF et 64LESmod. Ceci est particulièrement visible sur les profils radiaux en $z = 10D_0$.

Toutefois, on peut noter que les profils axiaux en DNS ne semblent pas tout à fait convergés, ceux-ci présentant un pic de vitesse en $z = 10D_0$ expliquant probablement la différence relevée sur les profils radiaux à cet endroit (figures 5.21(c) et 5.22(c)).

Concernant les profils moyens, $\langle \bar{u}_3 \rangle$, on observe que le modèle LES d'atomisation est systématiquement plus proche des résultats obtenus par le formalisme DNS que le modèle LES/VOF. Cependant le modèle LES d'atomisation n'apporte pas d'améliorations aussi nettes que ce qui a été observé pour la fraction de volume moyenne $\langle \bar{\Phi} \rangle$.

L'étude des profils des écarts types résolus, $S_{Dev}(\bar{u}_3)$, figures 5.23 et 5.24, montre à l'instar des profils moyens, un comportement très similaire entre le modèle LES d'atomisation et le formalisme LES/VOF. Cependant, la comparaison avec les résultats

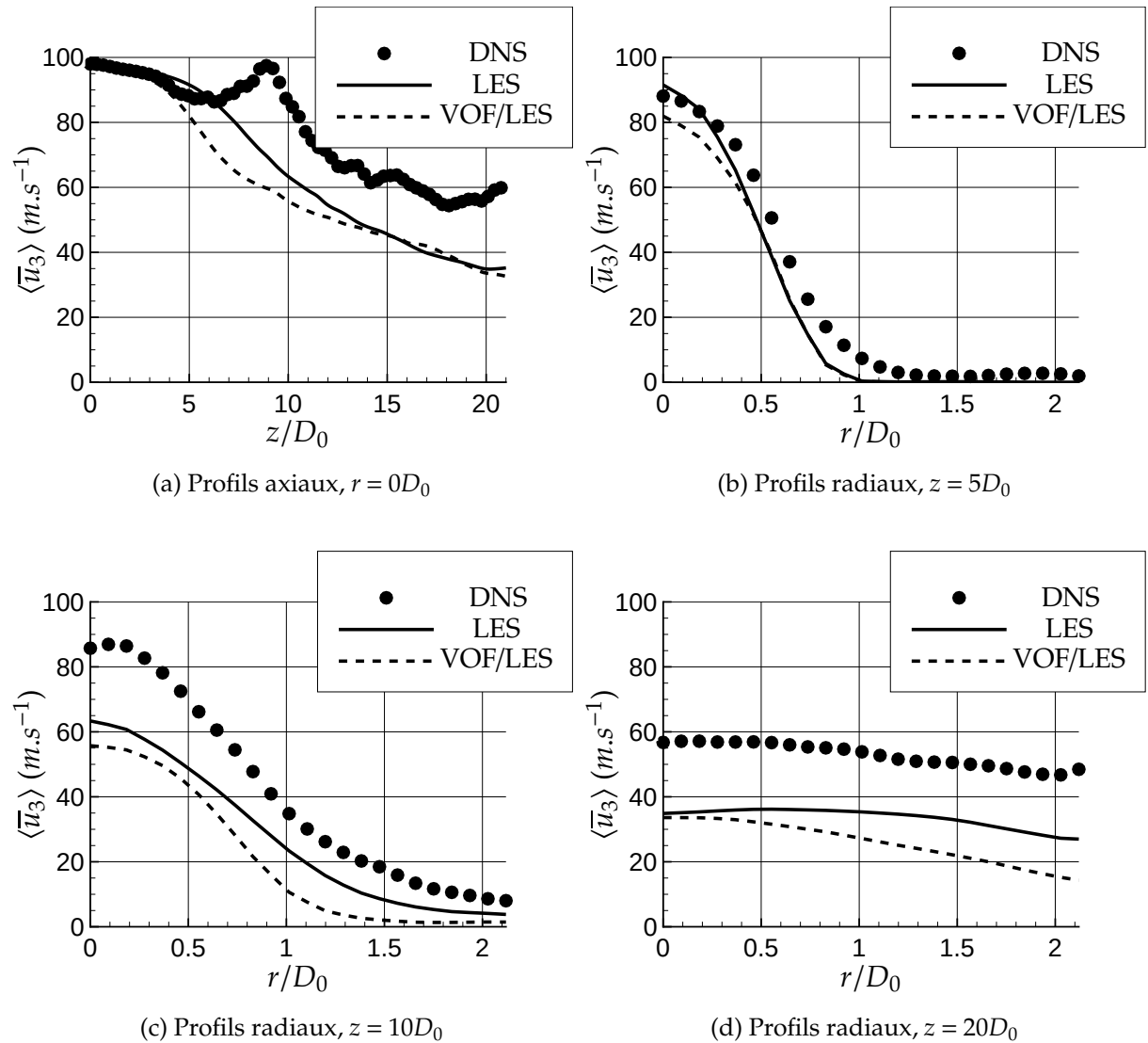


FIGURE 5.21 – Profils de la vitesse axiale moyenne, $\langle \bar{u}_3 \rangle$. Cas $32^2 \times 256$.

DNS est moins bonne que pour les profils moyens, $\langle \bar{u}_3 \rangle$.

En détails, on relève sur les profils radiaux, en $z = 5D_0$, que le comportement caractéristique de la zone de cisaillement (courbe en cloche centrée sur $r = 0.5D_0$) est bien reproduit par les deux modélisations, aussi bien avec le maillage $32^2 \times 256$ que $64^2 \times 512$ (figure 5.23(b) et 5.24(b)). Par contre, en $z = 10D_0$, les niveaux de $S_{Dev}(\bar{u}_3)$, obtenus avec les deux modèles LES, sont nettement inférieurs à ceux relevés avec le formalisme DNS, figure 5.23(c) et 5.24(c). Cette zone aux alentours de $z = 10D_0$ avait déjà été relevée comme problématique lors de l'étude des profils de fraction de volume, surtout pour le modèle LES/VOF. Cela est confirmé dans cette section pour $S_{Dev}(\bar{u}_3)$. Disposer d'un maillage plus fin ne permet pas d'améliorer ce comportement, voir induit un effet inverse, ce que l'on peut observer en comparant les figures 5.23(c) et 5.24(c).

Les profils axiaux, figures 5.23(a) et 5.24(a), montrent que le comportement global de l'écart type est relativement bien capturé avec les deux cas LES comparés au formalisme

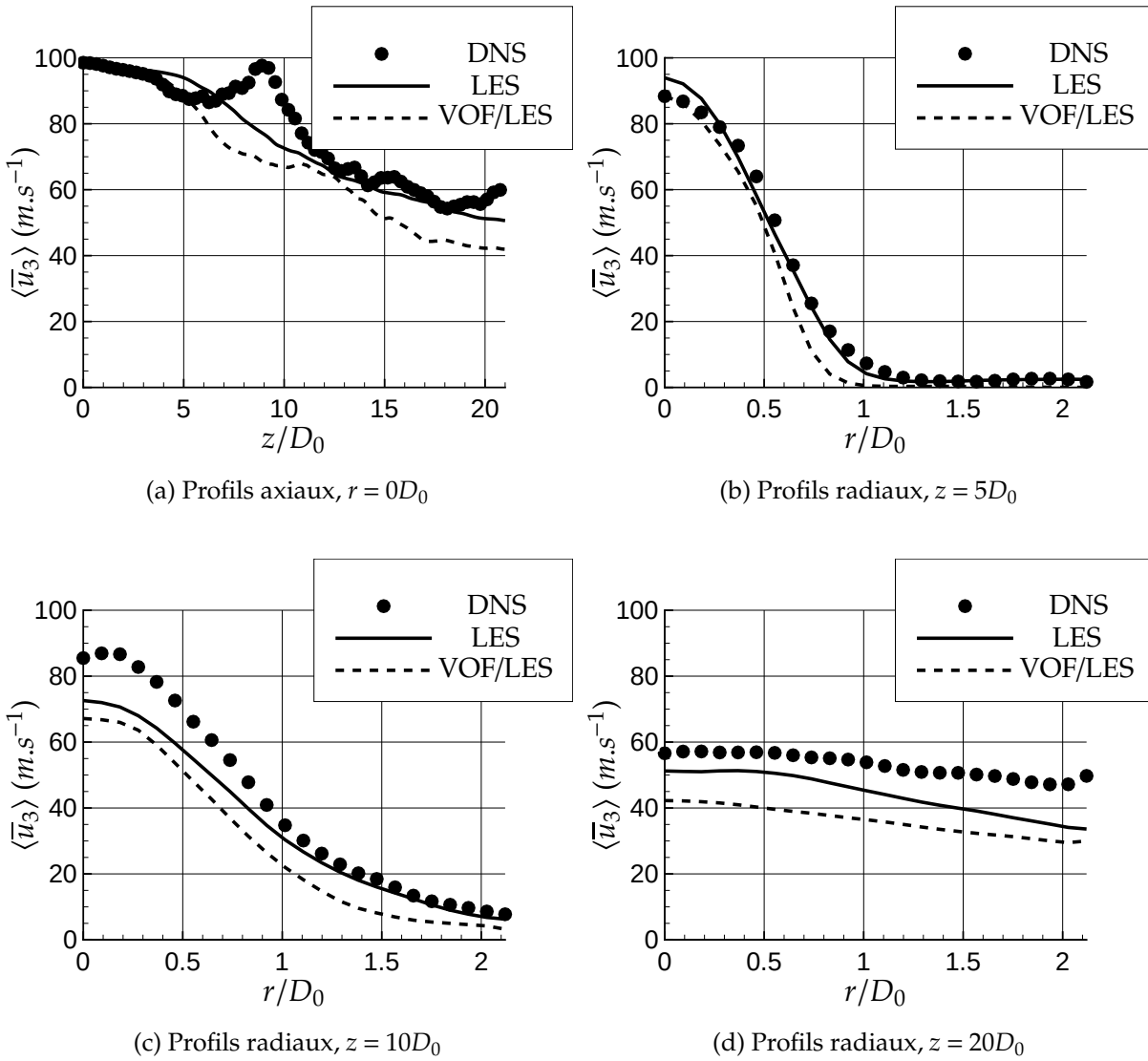


FIGURE 5.22 – Profils de la vitesse axiale moyenne, $\langle \bar{u}_3 \rangle$. Cas $32^2 \times 256$.

DNS. Néanmoins, les niveaux obtenus sont largement inférieurs à ceux issus de la DNS, avec des différences allant jusqu'à 50%.

L'étude du comportement de la vitesse axiale moyenne, $\langle \bar{\Phi} \rangle$, et surtout de l'écart type, $S_{Dev}(\bar{\Phi})$, permet d'émettre quelques remarques vis-à-vis de la modélisation de sous maille employée dans l'équation de quantité de mouvement résolue pour rendre compte des termes de sous maille.

En effet, notons que pour les deux simulations LES testées, le modèle de Smagorinsky [120] a été utilisé. De prime abord, il paraît donc cohérent que celles-ci mènent à des statistiques sensiblement identiques. Cependant, il convient de préciser que le modèle LES d'atomisation contient deux différences notables pouvant influencer sur l'équation de bilan de la quantité de mouvement résolue et au final auraient pu interférer sur les résultats obtenus en vitesse :

- La masse volumique et la viscosité sont prises en compte de manière continue en utilisant le champ de fraction de volume résolue, $\bar{\Phi}$ (équations 4.12 et 4.13 respectivement), contrairement au modèle LES/VOF où la fonction VOF joue alors le rôle d'indicatrice de phase. Les sauts de pression et de tenseur visqueux ont été modifiés en conséquence (c.f. 4.3.2.2) et ne sont pris en compte qu'à l'interface résolue (iso- $\bar{\Phi} = 0.5$). Le fait que les deux modèles LES testés, LES/VOF et LESmod, présentent des profils comparables d'écarts types laissent à penser que le modèle de Smagorinsky [120] impose une dissipation en sous maille très importante si bien que les modifications apportées à l'équations de transport de la quantité de mouvement ne jouent que peu en moyenne.
- La force de tension de surface n'est prise en compte qu'à l'interface résolue, c'est-à-dire dans les mailles de calcul où $\bar{\Phi} = 0.5$. Or, comme cela a été vu, le transport de fraction de volume résolue mène à des résultats sensiblement différents selon la modélisation utilisée, du moins en moyenne. Pour ce point, et considérant le nombre de Weber liquide relativement élevé du cas simulé, il est possible que la tension de surface n'ai que peu d'effet sur le résultat.

Enfin, le fait que les écarts types relevés se comparent parfois difficilement avec le cas DNS peut provenir soit d'une dissipation numérique trop importante ou encore d'un problème de modélisation. Concernant la modélisation, on rappelle en effet que les tests *a priori*, menés au chapitre 3 avaient montré que le modèle de similarité d'échelles [3] semblait plus à même de reproduire les effets des différents termes de sous maille dans l'équation de la quantité de mouvement résolue que celui de Smagorinsky [120]. Or, les calculs se sont révélés systématiquement instables avec le modèle de similarité d'échelles appliqué au différents termes de sous maille. De manière pratique, pour palier à ce problème, la somme des contributions de sous maille, dans l'équation 4.22, a donc été modélisée avec celui de Smagorinsky⁷ [120] :

$$2 \frac{\partial C_s \bar{\rho} \bar{\Delta}^2 |\bar{S}| \bar{S}_{ij}}{\partial x_j} \simeq \frac{1}{\bar{\rho}} \left(\frac{\partial \tau_{\rho u_i}}{\partial t} - \bar{u}_i \frac{\partial \tau_{\rho u_j}}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{\rho u_i u_j}}{\partial x_j} \right) \quad (5.14)$$

Dans cette expression, la totalité des termes de sous maille se trouvent être modélisés par un terme unique et ne peuvent plus, le cas échéant, se compenser entre eux. Précisons, de plus, que la procédure dynamique n'a pas permis de changer les conclusions exprimées ici.

Il est cependant possible d'espérer améliorer quelque peu ces résultats. Soit en identifiant les causes à l'origine des instabilités numériques observées avec le modèle de similarité d'échelle. Auquel cas, l'utilisation de ce modèle pourrait permettre de modéliser la contribution de sous maille totale terme à terme. Une autre alternative serait d'utiliser un modèle mixte, tel celui de Bardina *et al* [3].

7. Celui-ci étant un modèle visqueux, il est en effet connu pour être stable numériquement.

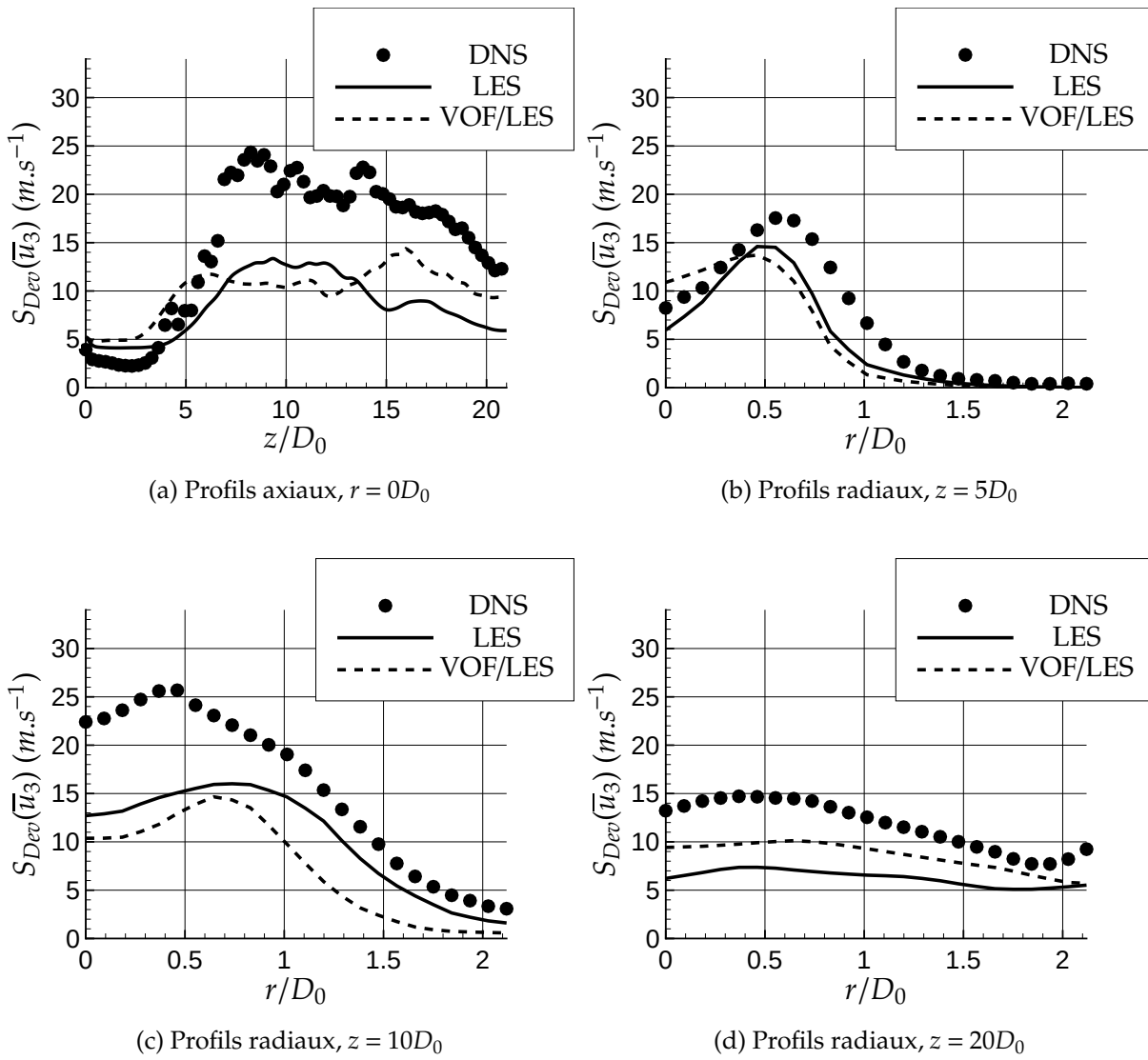


FIGURE 5.23 – Profils d'écarts types de la vitesse axiale $S_{Dev}(\bar{u}_3)$. Cas $32^2 \times 256$.

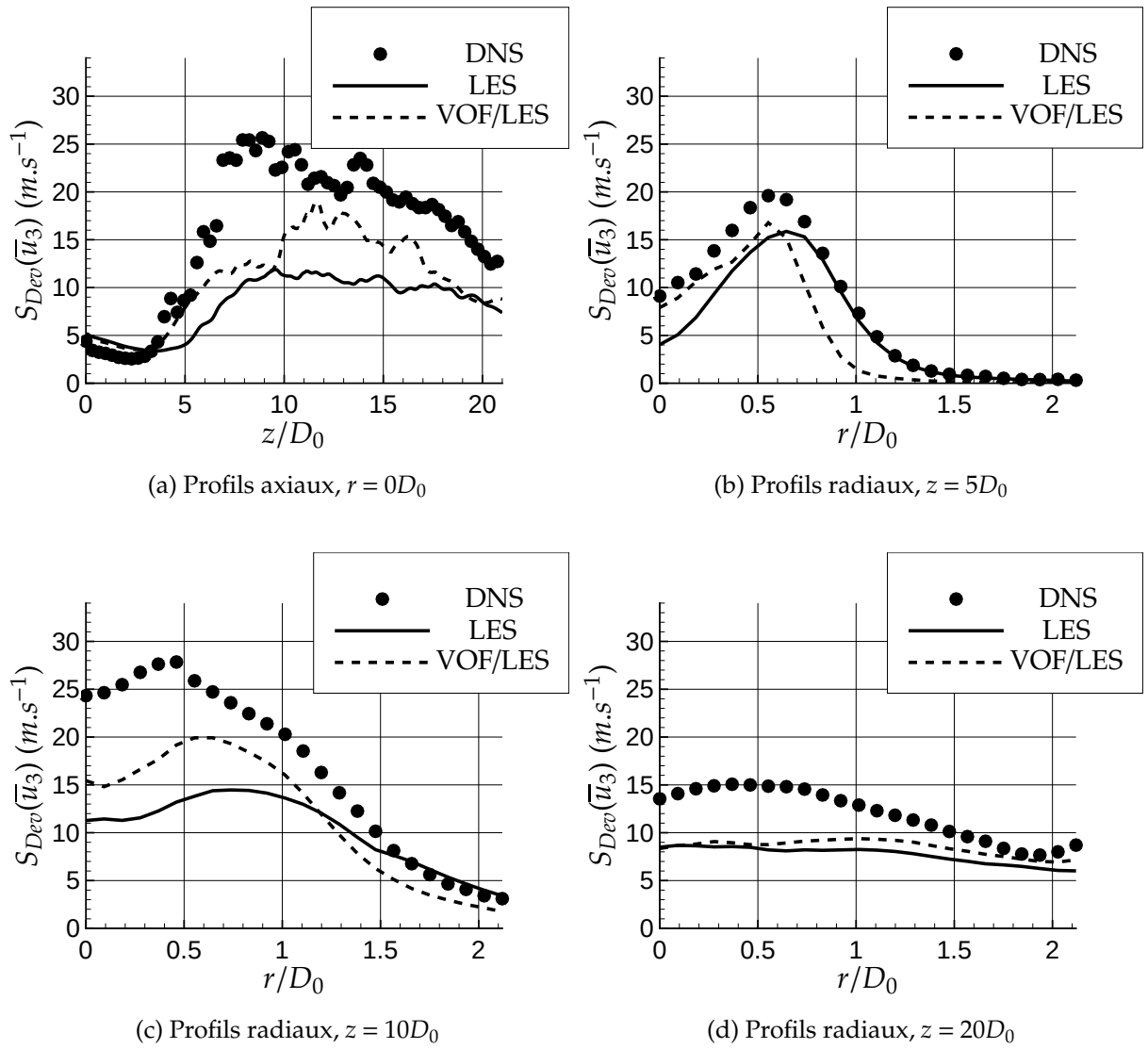


FIGURE 5.24 – Profils d'écarts types de la vitesse axiale $S_{Dev}(\bar{u}_3)$. Cas $64^2 \times 512$.

5.3.3 Discussion sur l'aspect numérique

Il a été mentionné à plusieurs reprises que la diffusion numérique pouvait jouer un rôle de manière significative dans les résultats obtenus. Cette dissipation numérique a pour origine les erreurs numériques introduites par les schémas de discrétisation. En outre, ces erreurs numériques ont tendance à lisser la solution obtenue et notamment dans les zones de forts gradients

Spécifiquement pour le modèle LES d'atomisation, cela peut conduire à surestimer l'atomisation en sous maille car, comme on l'a vu, c'est par un processus de diffusion, théoriquement induit par le terme de sous maille de la fraction de volume résolue, $\overline{\Phi}$, que la dispersion du spray en sous maille s'effectue.

On peut illustrer qualitativement le fait que la diffusion numérique est importante dans notre cas en comparant des champs instantanés de DNS filtrés et ceux issus du modèle LES. Ainsi, la figure 5.25 présente des champs DNS instantanés de fraction de volume filtrés en (a), (b) et (c) avec $\overline{\Delta} = 2, 8$ et $14\Delta_x^{DNS}$ respectivement. Ceux obtenus avec le modèle LES d'atomisation sont visibles en (d) et (e) sur cette même figure, pour deux maillages différents, $64^2 \times 512$ et $32^2 \times 256$ respectivement. La figure 5.25(a) devrait se comparer à la figure 5.25(d) puisque la taille du filtre utilisé pour filtrer la DNS, $\overline{\Delta}$, équivaut à la taille théorique du filtre implicite LES, $\overline{\Delta}_{th}$. En effet, en notant Δ_x^{LES} et Δ_x^{DNS} les tailles de mailles en LES et DNS respectivement, il vient : $\overline{\Delta}_{th} \sim \overline{\Delta} = \Delta_x^{LES} = 2\Delta_x^{DNS}$.

On peut alors observer que le champ de $\overline{\Phi}$ en LES est beaucoup plus diffus que celui obtenu sur la DNS filtrée. Cela s'observe proche injecteur où, dans la direction transverse, la largeur sur laquelle varie $\overline{\Phi}$ est plus grande qu'en DNS. Plus loin, alors que le champ DNS filtré présente encore beaucoup de structures résolues, on ne retrouve pas l'équivalent en LES mais un champ continu très « lissé ».

Ces observations permettent d'estimer que le filtre implicite est plus grand que la maille de calcul LES : $\overline{\Delta}_{th} > \Delta_x^{LES}$. Le cas en $32^2 \times 256$, figures 5.25(e), comparé à la DNS filtrée avec $\overline{\Delta} = 4\Delta_x^{DNS}$ mène à des conclusions semblable.

De prime abord, il est possible de remettre en cause la modélisation du terme de sous maille de la fraction de volume mais précisons que cet effet perdure, dans une moindre mesure cependant, lorsque l'on choisi de négliger ce dernier ($\tau_{\Phi_i} = 0$). La seconde origine possible de cet effet est une diffusion numérique conséquence des schémas utilisés pour transporter la fraction de volume résolue.

Initialement, pour l'équation de transport de la fonction level-set dans ARCHER, un schéma WENO d'ordre 5 avait été intégré au solveur pour discrétiser son terme d'advection. En outre, Tanguy [125] avait montré que pour la fonction *level-set* il était nécessaire de disposer de schémas numériques possédant un ordre de convergence élevé aussi bien pour le terme temporel que pour le terme convectif de son équation de transport.

En pratique, le fait d'avoir de forts gradients locaux de $\overline{\Phi}$, ce qui est le cas proche injecteur par exemple, nous a poussé à utiliser le schéma WENO d'ordre 5 déjà présent dans le solveur ARCHER pour le transport de cette variable. En effet, celui-ci permet de supporter de forts gradients et des discontinuités tout en résolvant précisément les zones continues. Néanmoins, ce schéma est connu pour être dissipatif près des

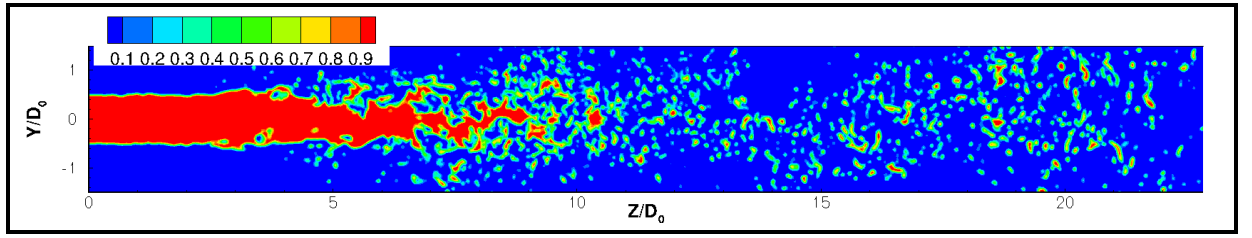
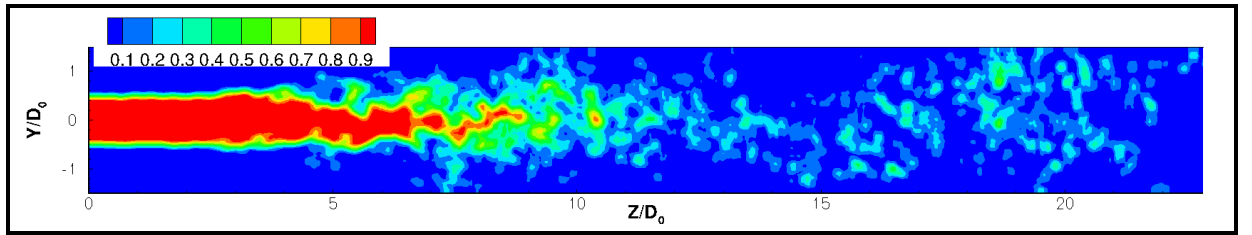
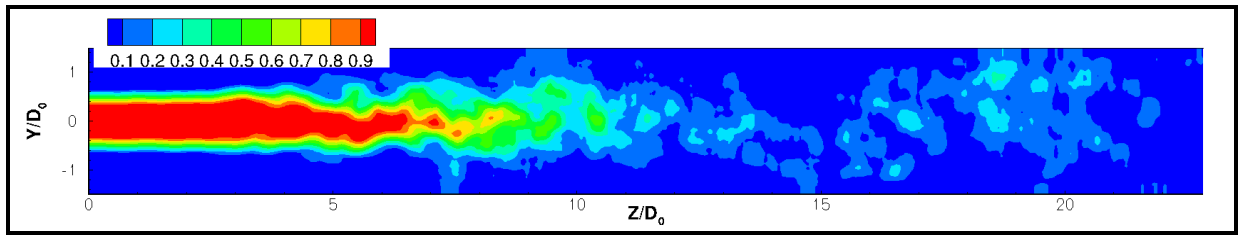
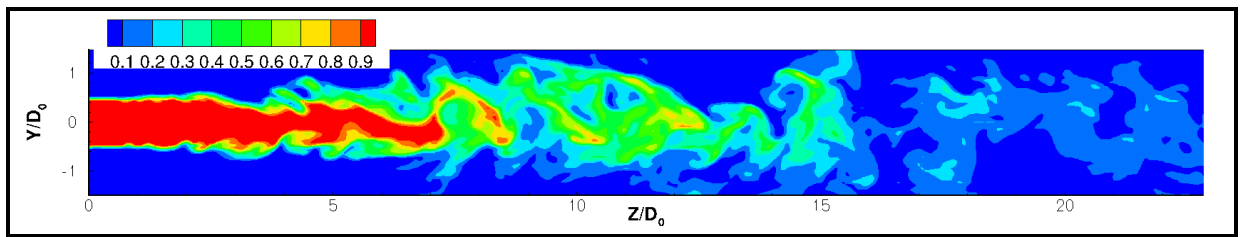
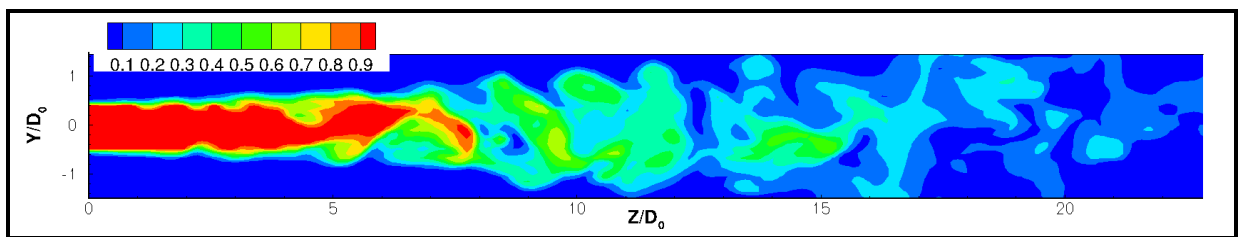
(a) DNS ($128^2 \times 1024$), $\bar{\Delta} = 2\Delta_x^{DNS}$ (b) DNS $\bar{\Delta} = 8\Delta_x^{DNS}$ (c) DNS $\bar{\Delta} = 14\Delta_x^{DNS}$ (d) Modèle LES $64^2 \times 512$ (e) Modèle LES $32^2 \times 256$

FIGURE 5.25 – Champs DNS instantanés de fraction de volume filtrés *a posteriori* pour différentes tailles de filtre, $\bar{\Delta}$, figures (a), (b) et (c). Comparaison avec des champs instantanés obtenus par le modèle LES pour deux maillages différents, figures (d) et (e).

discontinuités.

Nous revenons donc, dans cette section, sur les raisons qui ont motivé ce choix. Et un réexamen de celui-ci sera réalisé afin de savoir s'il n'est pas possible d'améliorer ce point délicat que constitue la discrétisation de l'équation de transport de $\bar{\Phi}$.

Les schémas de classe WENO : En DNS, on souhaite garder les discontinuités et les méthodes de suivi d'interface tirent partie de cet aspect en utilisant des schémas totalement antidiffusifs, à l'instar de la méthode VOF/PLIC [41]. Néanmoins ces schémas ne sont pas applicables pour le modèle LES, car ils ne sont pas capables de traiter les zones de variations continues. Ainsi, on ne peut pas utiliser les mêmes approches en DNS et en LES, ce qui limite d'ailleurs le cas asymptotique d'un retour aux résultats DNS lorsque $\Delta_x^{LES} \rightarrow \Delta_x^{DNS}$.

En LES la problématique du transport d'un scalaire tel que la fraction de volume, est donc qu'il faut disposer d'un schéma capable de prendre en compte à la fois les zones continues et les discontinuités ou « marches ».

On rejoint là une des problématiques de la simulation des écoulements avec propagations d'ondes de choc. Ces dernières constituent en effet des zones où les grandeurs physiques varient brutalement. La prédiction de tels phénomènes requiert des méthodes numériques très robustes capables de décrire les discontinuités de certaines variables

Or, une brève revue de la littérature concernant la simulation de ce type d'écoulement, où le nombre de Mach est supérieur à un, révèle que la plupart des auteurs préconisent l'utilisation des schémas de la classe WENO surtout pour leur capacité à supporter les discontinuités sans induire d'instabilités numériques. Ce dernier point est important, car les autres schémas testés pour le transport de $\bar{\Phi}$ du type dérivée centrée où *upwind* se sont montrés systématiquement instables. En contrepartie ces schémas introduisent des erreurs numériques dissipatives qui ont tendance à lisser la solution obtenue près de discontinuités.

Par exemple, la figure 5.26 présente les résultats obtenus avec différents schémas de discrétisation spatial pour le transport en une dimension d'un scalaire, noté A . Précisément, on teste les schémas *upwind* d'ordre 1 et 2, centrés d'ordre 2 et le WENO d'ordre 5 utilisé pour transporter la fraction de volume résolue. L'équation de transport de A s'écrit :

$$\frac{\partial A}{\partial t} + u \frac{\partial A}{\partial x} = 0 \quad . \quad (5.15)$$

Le domaine est périodique. Après quatre tours les résultats montrent que seul le schéma WENO permet de bien rendre compte du transport du scalaire, A , composé quatre profils différents. Ainsi il ne présente pas d'instabilité, contrairement au schéma centré, et la dissipation aux niveaux des discontinuités reste limitée et beaucoup moins importante que pour les schémas de type *upwind*. Augmenter l'ordre de convergence des schémas conduit à des conclusions identiques face au schéma WENO. Pour la variable hydrodynamique $\bar{\Phi}$ du modèle, en trois dimensions, les schémas testés rendent compte du même comportement qu'en une dimension. À l'heure actuelle et à notre

connaissance il semble donc que les schémas WENO constituent l'un des meilleurs compromis entre précision, diffusion numérique et une bonne robustesse pour le transport de la fraction de volume résolue. Son choix est justifié ici. On revient donc sur celui-ci.

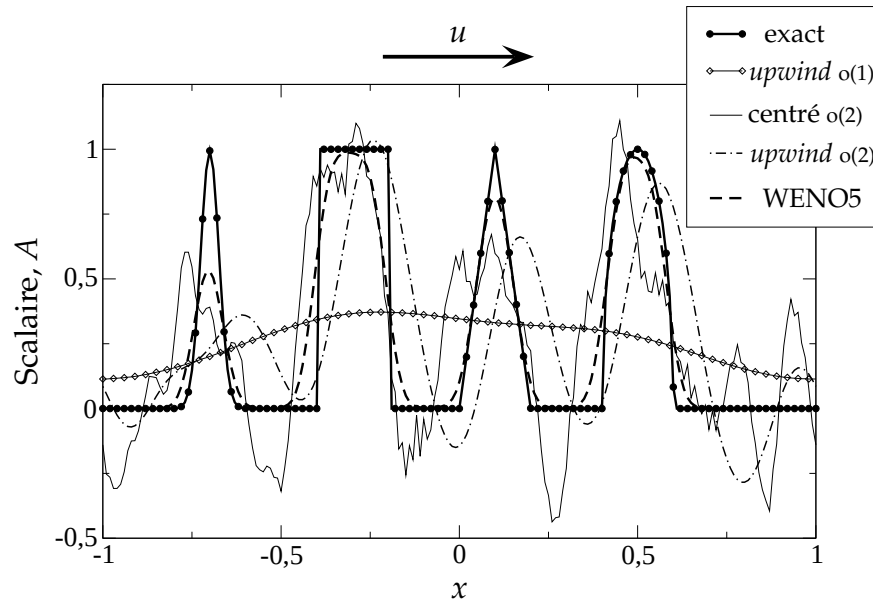


FIGURE 5.26 – Résultats du transport d'un scalaire par un champ de vitesse, u , dirigé de la gauche vers la droite. 4 tours ont été parcourus et la discrétisation spatiale est de 200 points.

Cette classe de schéma a donc été initialement développée dans le cadre des écoulements compressibles. Les schémas WENO trouvent leurs origines dans les travaux de Shu *et al* [115] sur les schémas ENO (*Essentially Non Oscillatory*) qui ont proposé une discrétisation pour les lois hyperboliques « intrinsèquement robuste » quelles que soient les singularités de la solution et présentant une dissipation moindre par rapport aux schémas antérieurs.

Les schémas ENO et WENO, généralisés par Jiang *et al* [52], utilisent un certain nombre de *stencils* adaptatifs, noté S_k , afin d'estimer de façon automatique la solution numérique la plus régulière possible du terme convectif permettant d'obtenir un ordre de résolution élevé et d'éviter les oscillations numériques proches des discontinuités. Par exemple, pour le WENO de Jiang *et al* [52], chaque *stencil* contient r points du maillage et le nombre de *stencils* est égal à r .

L'information nécessaire, par exemple $\widehat{f}$ (en fait une dérivée ou un flux selon les cas), est interpolée sur chaque *stencil* par des polynômes d'interpolation essentiellement non oscillants (polynômes de Lagrange). À la différence des schémas ENO, où l'on choisit le *stencil* le plus régulier, dans le formalisme WENO la solution recherchée en un point discret est alors la somme pondérée de chacun des *stencils*. La pondération dépend alors d'un indicateur de régularité ou *smoothness indicator*, noté IS_k . Cet indicateur est construit de telle sorte que si l'un des *stencils* interpole $\widehat{f}$ à travers une discontinuité alors on lui attribue un poids minimum de manière à minimiser sa contribution et par

conséquent les erreurs numériques associées.

Pour assurer plus de stabilité ces schémas sont de type *upwinding* c'est-à-dire que la position de ces *stencils* par rapport au point discret du maillage dépend du signe local de la vitesse. Cela est illustré en une dimension sur la figure 5.27 où sont représentés les *stencils* candidats, S_k , pour calculer la variable quelconque $\widehat{f}$ en $i + 1/2$. Alors $\widehat{f}_{i+1/2} = \widehat{f}_{i+1/2}^+$ si $u_{i+1/2} > 0$, en (a) et $\widehat{f}_{i+1/2} = \widehat{f}_{i+1/2}^-$ dans le cas contraire, en (b).

On comprend également sur cette figure que l'ordre de la méthode dépend du nombre de *stencils* k utilisés pour estimer $\widehat{f}$ au point d'intérêt. Pour cet exemple précis où $r = 3$ et si la fonction $\widehat{f}$ est régulière autour du point $i + 1/2$ alors les poids de chaque *stencils* sont égaux et la méthode est alors d'ordre 5. On peut voir sur la figure 5.26 que le dernier profil en forme de « bosse », qui est continu, est ainsi quasiment parfaitement calculé.

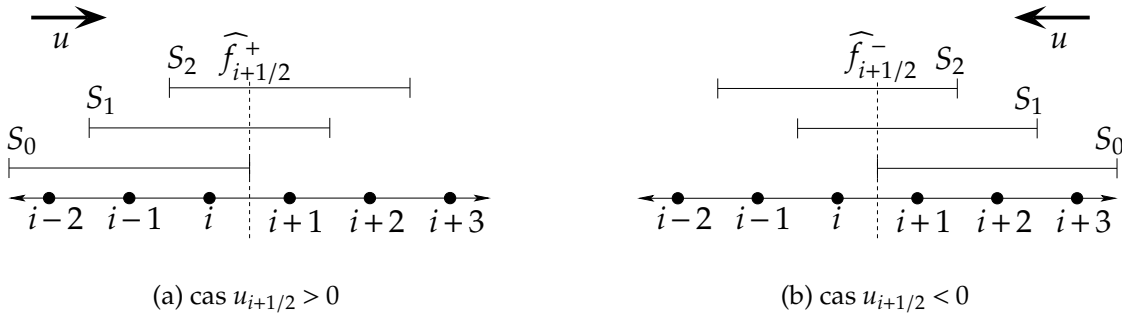


FIGURE 5.27 – *Stencils*, S_k , candidats pour le calcul de $\widehat{f}_{i+1/2}$, avec $r = 3$ pour le schéma WENO de Jiang *et al* [52].

Pour résumer, on peut donc voir les schémas WENO comme une combinaison de schémas centrés sur les *stencils* et qui estiment au mieux le terme convectif grâce à l'indicateur IS_k pour éviter les instabilités numériques. Associés à un schéma d'intégration temporel d'ordre élevé tel Runge-Kutta (d'ordre 3 ou 4), ces schémas permettent de trouver une solution numérique approchée et stable de l'équation de transport d'un scalaire. Les détails du schéma WENO [52] utilisé par la suite pourront être trouvés dans l'annexe A.

Visions « conservative / non conservative » : Dans ses travaux de thèse, Couderc [21] met en lumière le fait que considérer une approche de type différences finies ou volumes finis pour résoudre l'équation de transport de la *level-set* implique une différence non seulement au niveau de la mise en œuvre du schéma WENO mais également sur les résultats obtenus.

En outre, il raccorde l'approche aux différences finies à la formulation non conservative de l'équation de transport du scalaire A . En une dimension c'est la forme de l'équation de transport 5.15. Dans ce cas il montre que si l'on note $\mathcal{L}$ l'opérateur d'interpolation WENO, alors le terme convectif se calcule, sur le point du maillage repéré par i , comme :

$$(u \frac{\partial A}{\partial x})|_i \simeq u_i \mathcal{L}_i(\frac{\partial A}{\partial x}) . \quad (5.16)$$

Dans ce cas, avec le schéma WENO, on estime la dérivée du scalaire A au point d'intérêt. Cependant, si la divergence du champ de vitesse de l'écoulement peut être considérée comme nulle, on peut ré-écrire l'équation de transport sous sa forme conservative. L'équation 5.15 s'écrit alors :

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial uA}{\partial x} = 0 . \quad (5.17)$$

Couderc [21] raccorde ici cette formulation avec l'approche volumes finis. Ce dernier note alors que sous cette forme c'est le flux du scalaire, uA , qui doit être approximé par le schéma WENO, et non pas sa dérivée comme précédemment, on écrit alors :

$$(\frac{\partial uA}{\partial x})|_i \simeq \frac{\mathcal{L}_{i+1/2}(uA) - \mathcal{L}_{i-1/2}(uA)}{\Delta_x} , \quad (5.18)$$

avec Δ_x le pas d'espace. Même si les deux équations 5.15 et 5.17 sont en théorie équivalentes lorsque la divergence de vitesse est nulle, en pratique il semble qu'une solution intégrale de type volumes finis respecte mieux la physique du transport contenant de forts gradients locaux.

Les tests conduits en une dimension sur la résolution du transport du scalaire A confirment effectivement que la formulation conservative, que l'on notera WENO/c, donne des résultats plus proches de la solution exacte que la formulation non conservative, dorénavant notée WENO/n. Ceci est visible sur la figure 5.28(a) où les deux schémas WENO/n et WENO/c sont comparés. Le schéma WENO/c fait montre d'une diffusion numérique moindre, les profils sont mieux décrits (ceci est particulièrement visible sur le premier profil) et il semble que la solution numérique soit plus symétrique, comme on peut l'observer sur le deuxième profil de type *top hat*.

On notera que l'investigation des schémas WENO est toujours un domaine très actif et beaucoup d'auteurs cherchent à réduire la dissipation numérique inhérente à celui-ci. Ainsi, récemment et toujours dans le cadre des écoulements compressibles, Martín *et al* [87] proposent deux schémas WENO centrés à l'ordre 6 construits pour réduire cette dissipation, WENO-SYMOO et WENO-SYMBO que nous noterons WENO6-Ma1 et WENO6-Ma2 respectivement. La figure 5.28(b) montre, toujours sur une équation de transport monodimensionnelle, que ces deux schémas n'apportent pas de gain sensible, dans notre cas, par rapport à la version originale de Jiang *et al* [52] dans sa formulation conservative⁸.

Initialement, le terme convectif de l'équation de transport de la fraction de volume résolue, $\overline{\Phi}$ était discrétisé avec le schéma WENO5/n utilisé pour la fonction *level-set* dans la version DNS du solveur ARCHER⁹. Constatant sur les tests monodimensionnels, présentés ici, que la formulation WENO5 conservative apportait un gain non

8. Si bien que l'on renvoie aux travaux de Martín *et al* [87] concernant les détails de ces deux schémas.

9. Pour la fonction *level-set*, il n'a pas pu être établi que le schéma WENO/c apportait une amélioration notable par rapport au WENO/n (c.f. [21]).

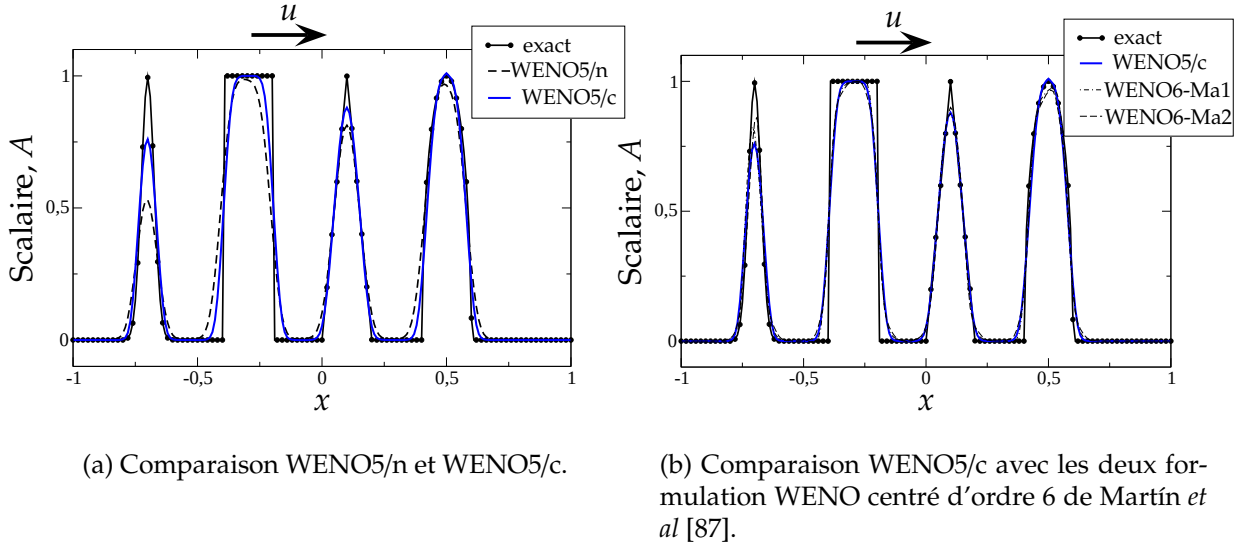


FIGURE 5.28 – Comparaison de différentes formulations WENO pour le transport d'un scalaire A en une dimension. La vitesse de convection, u , est dirigée de la gauche vers la droite. 4 tours ont été parcourus et la discrétisation spatiale est de 200 points.

négligeable en terme de résolution pour des fonctions discontinus, il a été décidé de tester cette dernière en trois dimensions.

Cas test en trois dimensions : Le cas test est présenté sur la figure 5.29. Celui-ci consiste à transporter une « goutte » de Φ par un champ de vitesse $\vec{U}$ constant dirigé selon la direction z (on ne résout donc pas Navier-Stokes). Le domaine de calcul est une boîte périodique dans cette même direction et dont l'arrête est de longueur L . Le maillage est de 32^3 d'où $\Delta_x = \Delta_y = \Delta_z$. L'équation de transport que l'on cherche à résoudre est alors :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \vec{U} \cdot \nabla \Phi = 0 . \quad (5.19)$$

La figure 5.30 compare les résultats obtenus par les WENO5/n (en a) et WENO5/c (en b) sur une coupe dans le plan xy , après 2 tours de boîtes. Et (c) et (d) après 20 tours, pour WENO5/n et WENO5/c, respectivement. En complément du champ de fraction de volume la position théorique de la « goutte » est visible en traits noirs et les $\text{iso-}\Phi = 0.5$ en rouge sur toutes ces figures.

On constate après 2 tours de boîte que les champs de Φ ont subi un processus de diffusion, aussi bien avec les méthodes WENO/n et WENO/c. Cependant, la topologie de la fraction de volume n'est pas tout à fait identique dans les deux cas. Le schéma WENO/c semble en effet donner un résultat plus symétrique, alors que la diffusion est plus importante dans la direction de l'écoulement pour le cas WENO/n. Il est également intéressant de constater que l'iso- $\Phi = 0.5$ pour le cas non conservatif (a) présente un léger retard sur la position exacte de l'interface que l'on ne retrouve pas en (b) avec la formulation conservative.

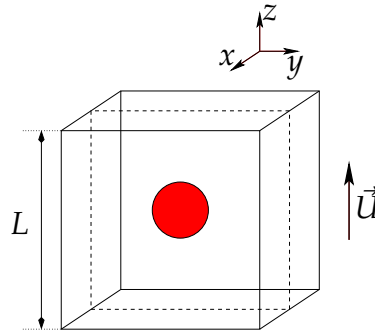


FIGURE 5.29 – Configuration du cas test pour la comparaison des schémas WENO/c et WENO/n en 3D. La vitesse de convection $\vec{U}$ est selon z positif et le domaine est périodique dans cette direction. La position des coupes yz visible sur la figure 5.30 est symbolisée en traits tirets sur ce schéma. Les trois directions de l'espace sont de longueur L et les pas d'espace sont égaux, $\Delta_x = \Delta_y = \Delta_z$.

Après 20 tours de boîte les différences entre les deux schémas sont plus notables encore. Les deux champs de fraction de volume présentent une « trainée » dans la direction opposée à l'écoulement. Cependant, la diffusion numérique provoquée par le schéma WENO/c (d) est nettement moins importante que pour le schéma WENO/n (c). De plus, la comparaison des iso- $\bar{\Phi} = 0.5$ montre que la « goutte » initiale est largement déformée dans le cas WENO/n alors que celle-ci reste dans de bonnes proportions dans le cas WENO/c par rapport au profil théorique. Ce comportement est important car on rappelle que cet iso-valeur de fraction de volume constitue l'interface résolue dans le modèle LES d'atomisation.

Bilan sur le transport de $\bar{\Phi}$ et implication sur le modèle LES : Les tests menés sur le transport d'un scalaire en trois dimensions, présentés dans le paragraphe précédent, montrent que le schéma WENO/c apporte une amélioration par rapport à la version antérieurement utilisée, WENO/n. Une intégration de ce schéma à donc été mis en œuvre au sein de la version LES du solveur ARCHER.

Ainsi la figure 5.31 montre un champ instantané typique de la fraction volumique de liquide résolue pour chacun des schémas numériques WENO/n, en (a), et WENO/c, en (b). On peut observer des fluctuations légèrement plus marquées qui se traduisent par exemple pour le WENO/c par la présence de grosses poches de liquide allant un peu plus loin que pour le cas WENO/n. Cependant le comportement du jet liquide reste essentiellement le même et n'apporte que peu d'amélioration sur les statistiques.

Il est donc clair que le problème des schémas numériques utilisables pour l'approche LES en atomisation n'est pas encore réglé. Notons que les approches développées par Vincent *et al* [134] ou encore des approches antidiffusives Xu *et al* [142] sont prometteuses et devront être testées dès qu'elles atteindront un stade de maturité suffisant.

Il serait aussi possible de coupler les approches de suivi d'interface non diffusives utilisées en DNS au schéma WENO. On aurait alors l'une ou l'autre approche suivant un critère qui dépendrait des structures de sous maille de l'interface. En attendant, il semble que les schémas WENO sont les mieux adaptés à ce problème, et que l'implémentation conservative soit préférable dans ces conditions.

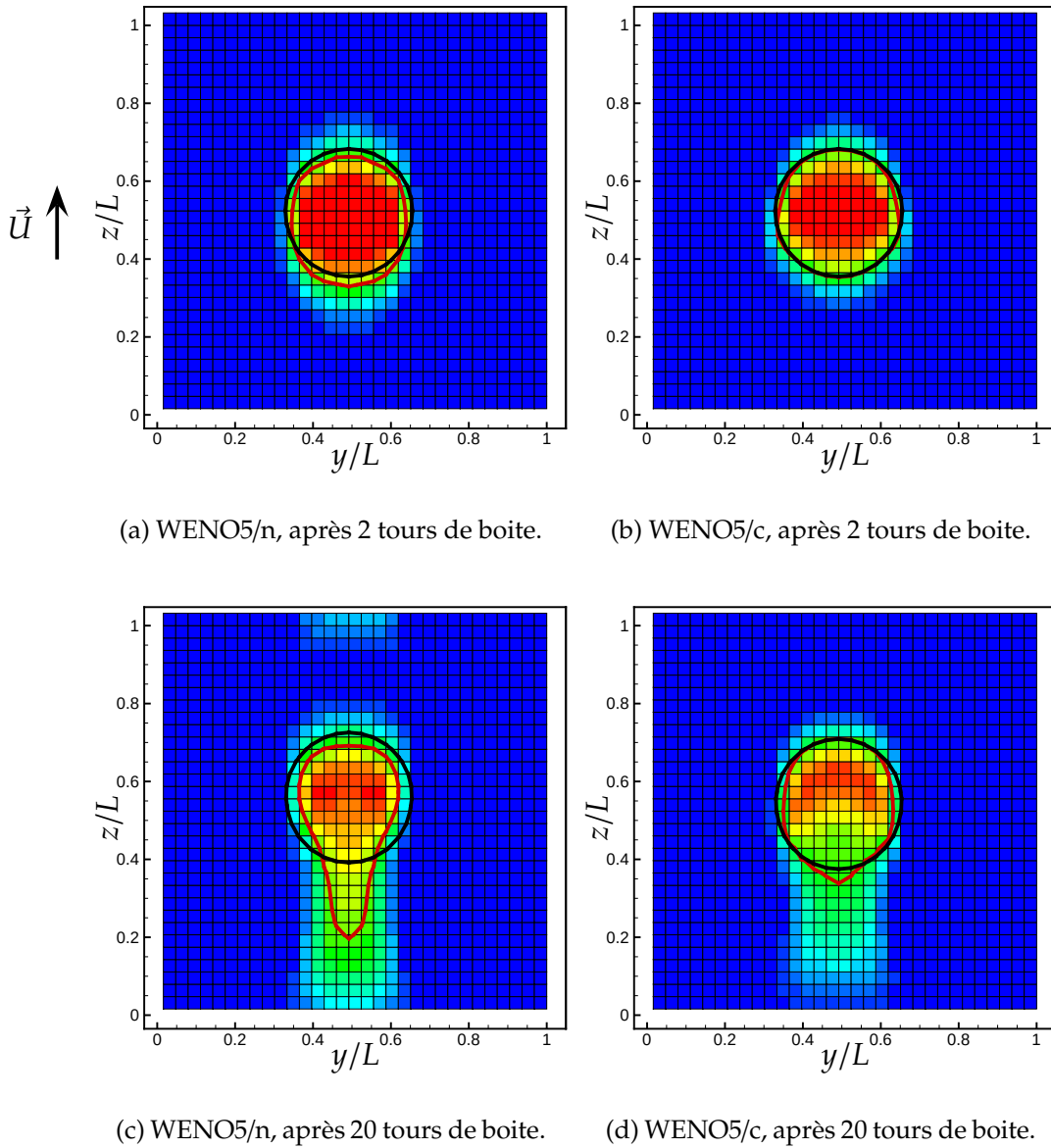
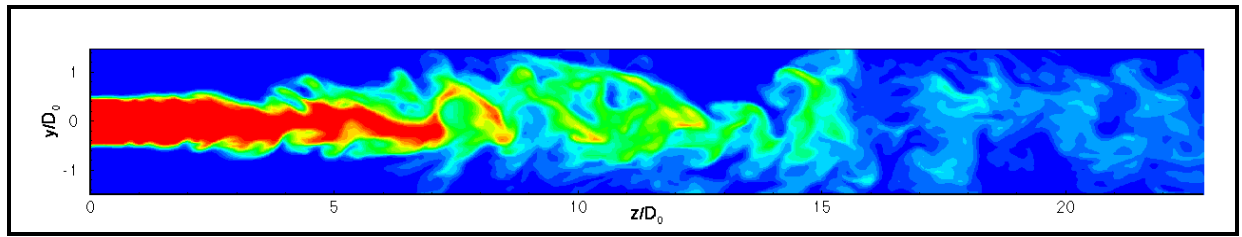
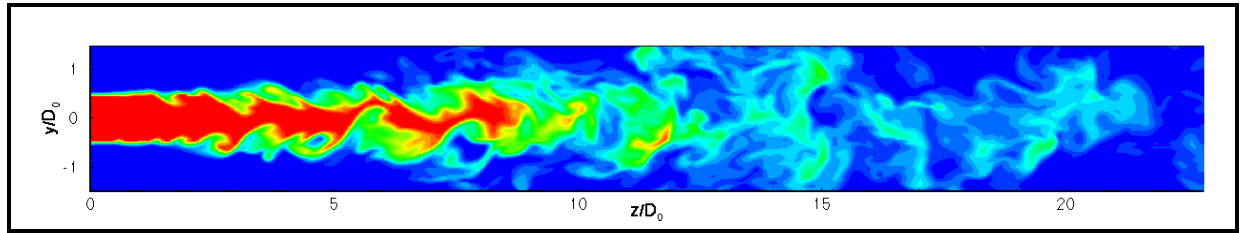


FIGURE 5.30 – Champs de fraction de volume, Φ après deux tours (en haut) et vingt tours (en bas) de boîtes. Transport avec WENO/n (à gauche) et WENO/c (à droite). L'iso-ligne noire représente la position de l'interface exacte et l'iso-ligne rouge correspond à $\Phi = 0.5$. La vitesse de convection, $\vec{U}$, est selon z positif.



(a) WENO/n



(b) WENO/c

FIGURE 5.31 – Champs LES de fraction de volume résolue obtenus avec les schémas WENO/n (a) et WENO/c (b), maillage $64^2 \times 512$.

Il reste cependant un dernier problème provoqué par l'effet dissipatif du schéma de transport de la fraction de volume. Ce fait impact directement le niveau de densité d'interface, $\bar{\Sigma}$, obtenu.

En effet, au chapitre 4, il a été vu que la densité d'interface minimale $\bar{\Sigma}_{min}$ pouvait s'estimer par la relation suivante :

$$a\bar{\Sigma}_{min} = \alpha \sqrt{\bar{\Phi}(1 - \bar{\Phi})} , \quad (5.20)$$

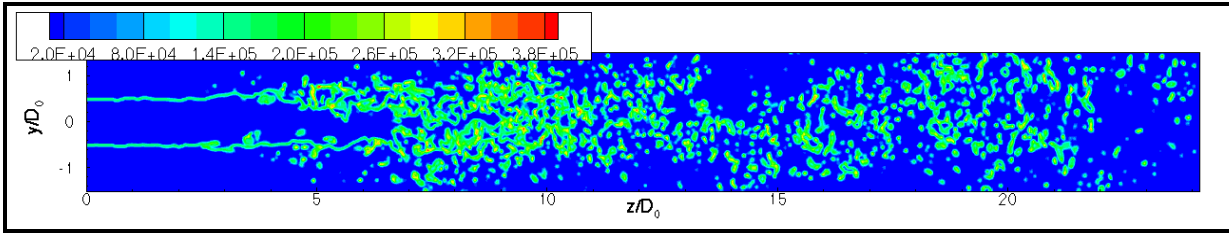
où a est l'échelle de longueur du volume de contrôle et α une constante ($\alpha = 2.4$). Sur les tests cette échelle de longueur, a , était égale à Δ_x , la taille de la maille de calcul.

En pratique, et en choisissant $a = \Delta_x^{LES}$, cela revient à surestimer $\bar{\Sigma}_{min}$ car le zone de transition entre le liquide et le gaz est artificiellement « épaissie » par la diffusion numérique de $\bar{\Phi}$. La quantité d'interface minimale, $\bar{\Sigma}_{min}$, traduit cette diffusion comme une atomisation numérique supplémentaire. Ceci pose problème dans les zones où l'interface devrait être bien résolue par le maillage et où, par conséquent, les gradients de fraction de volume devraient être de l'ordre de $1/\Delta_x^{LES}$.

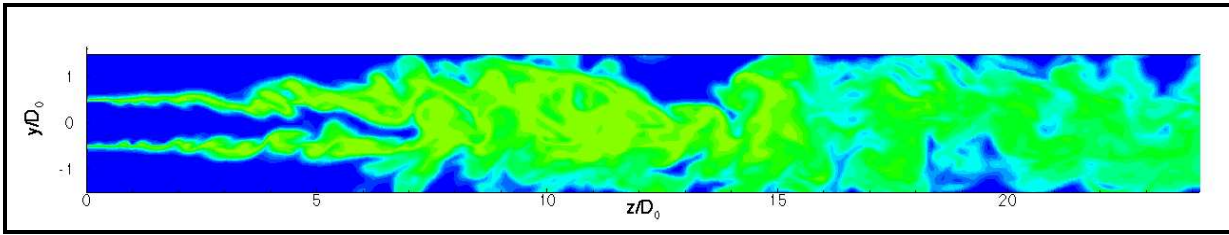
Cela est illustré sur la figure 5.32 où un champ de densité d'interface filtrée, avec $\bar{\Delta} = 2\Delta_x^{DNS}$, est comparé avec un champ de densité d'interface minimale, $\bar{\Sigma}_{min}$, obtenu en prenant $a = \Delta_x^{LES}$ avec un maillage $64^2 \times 512$. On peut observer que les niveaux sont comparables en se référant au champ de couleur, mais il est clair que l'épaisseur de variation de $\bar{\Sigma}_{min}$ est bien supérieure à celle de $\bar{\Sigma}$ en DNS. Ce fait est particulièrement visible proche injecteur, dans la zone de cisaillement de vitesse.

Cela conduit globalement à surévaluer le niveau de $\bar{\Sigma}_{min}$ et par voie de conséquence

celui de $\bar{\Sigma}$ en LES. D'une part, parce que la densité d'interface est décomposée comme sa valeur minimale à laquelle on ajoute une fluctuation, telle que $\bar{\Sigma} = \bar{\Sigma}_{min} + \bar{\Sigma}'$. Et que d'autre part, le terme source, $\bar{\Sigma}_{int}$, présent dans l'équation de transport de la fluctuation de $\bar{\Sigma}'$ (équation 4.95) dépend de la valeur locale de la densité d'interface minimale. Et ce, à travers le terme $\bar{\Sigma}$ mais également dans l'expression de la densité d'interface à l'équilibre, $\bar{\Sigma}_{crit}$ (c.f. relation 5.1). Une mauvaise évaluation de $\bar{\Sigma}_{min}$ conduit donc à systématiquement surestimer la densité d'interface.



(a) $\bar{\Sigma}$, DNS, $128^2 \times 1024$, $\bar{\Delta} = 2\Delta_x^{DNS}$



(b) $\bar{\Sigma}_{min}$, modèle LES, $64^2 \times 512$

FIGURE 5.32 – Champ DNS instantané de densité d'interface filtré *a posteriori*. Taille de filtre, $\bar{\Delta} = 2\Delta_x^{DNS}$ en (a). Comparaison avec un champ instantané de densité d'interface minimale $\bar{\Sigma}_{min}$ obtenu par le modèle LES en (b), maillage $64^2 \times 512$.

Néanmoins, constatant que les tendances globales de la densité d'interface obtenue en LES présentent de fortes similitudes avec la DNS, même si les niveaux ne sont pas comparables, on propose une modification de l'expression de $\bar{\Sigma}_{min}$ afin de prendre en compte cet effet dissipatif du schéma de transport dans la modélisation.

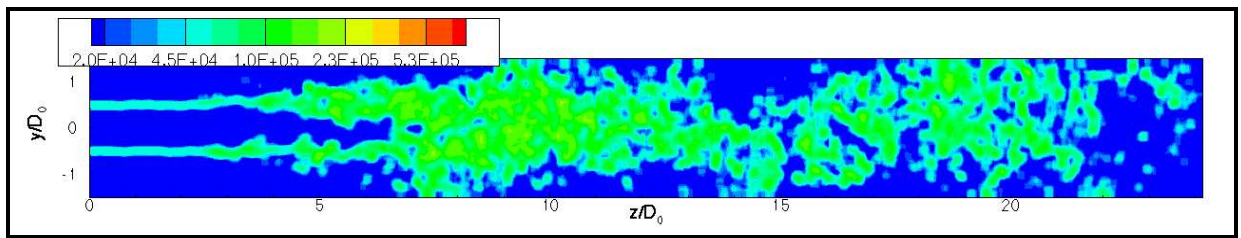
Les différents tests conduits dans cette section ainsi que l'étude des champs instantanés montrent que la diffusion numérique induit un effet sur la taille du filtre implicite LES, $\bar{\Delta}_{th}$, celui-ci est alors tel que $\bar{\Delta}_{th} > \Delta_x^{LES}$. On assimile alors le fait qu'il faille un nombre minimal de mailles, n , au schéma WENO pour décrire une discontinuité comme une opération de filtrage dont l'échelle de filtre est de $\bar{\Delta}_{WENO} = n\Delta_x^{LES}$.

Dans cette optique on propose alors de choisir l'échelle de longueur dans la relation 5.20 comme $\bar{\Delta}_{WENO}$. Ceci a alors pour effet de répartir le niveau de $\bar{\Sigma}_{min}$ sur une échelle de variation proche de $\bar{\Delta}_{th}$.

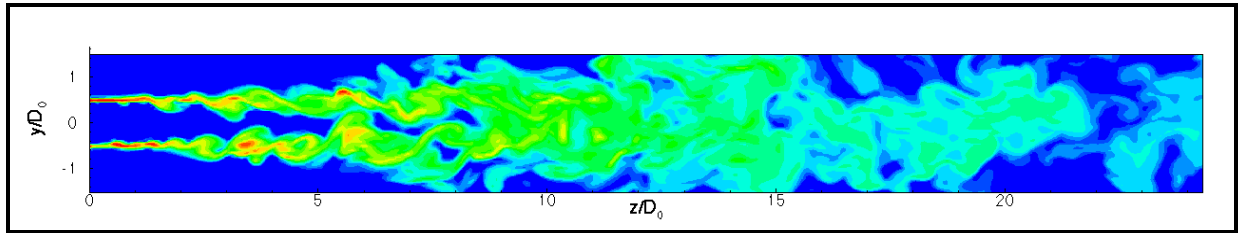
En pratique, les tests de transport d'un scalaire sur des cas mono-dimensionnels et tridimensionnels, menés dans les paragraphes précédents, conduisent dans le cas

du WENO/c à estimer : $n \simeq 4$ (c.f. figures 5.28(a) et 5.30(a)). Après avoir opéré cette modification, on peut observer sur la figure 5.33 que les champs instantanés de densité d'interface $\bar{\Sigma}$, obtenus en LES (b), et calculés *a posteriori* à partir de la DNS (a), se comparent bien en terme de niveaux, ce qui n'était pas le cas auparavant. Précisons que pour la DNS, la taille du filtre utilisée pour comparer ces deux champs est de $\bar{\Delta} = 8\Delta_x^{DNS}$ ce qui correspond ici à $\bar{\Delta}_{WENO}$ en LES où le maillage est de $64^2 \times 512$.

Cette modification prise en compte, la section suivante présente les statistiques obtenues pour la densité d'interface liquide/gaz, $\bar{\Sigma}$, avec le modèle LES d'atomisation. Et ce, toujours en terme de moyennes résolues que l'on comparera aux cas DNS et à la modélisation LES/VOF.



(a) $\bar{\Sigma}$, DNS, $128^2 \times 1024$, $\bar{\Delta} = 8\Delta_x^{DNS}$



(b) $\bar{\Sigma}$, modèle LES, $64^2 \times 512$

FIGURE 5.33 – Champ DNS instantané de densité d'interface filtré *a posteriori*. Taille de filtre, $\bar{\Delta} = 8\Delta_x^{DNS}$ en (a). Comparaison avec un champ instantané de densité d'interface, $\bar{\Sigma} = \bar{\Sigma}_{min} + \bar{\Sigma}'$ obtenu par le modèle LES en (b), maillage $64^2 \times 512$.

5.3.4 Spray de sous maille

Au sein du modèle, développé lors de ces travaux de thèse, la densité d'interface joue un rôle important puisque c'est grâce à cette variable et son transport que l'on peut espérer être à même de décrire le spray de sous maille, par exemple à travers l'échelle l_{D32} . Dans cette section on cherche donc à savoir dans quelle mesure les modélisations, développées au chapitre 4 et mises en œuvre pour le transport de cette variable, permettent de rendre compte des niveaux et du comportement de la densité d'interface.

Une zone d'ombre subsiste quand à la valeur du Weber d'équilibre, We_{crit} . En outre, les résultats montrent que la valeur du Weber d'équilibre est d'importance car

elle influe grandement sur les niveaux de densité d'interface obtenus au cours des différentes simulations.

5.3.4.1 Profils moyens de densité d'interface

Les figures 5.34 et 5.35 présentent les profils moyens, axiaux et radiaux, de densité d'interface, $\langle \bar{\Sigma} \rangle$, pour les cas 32LESmod et 64LESmod, respectivement. À l'instar des comparaisons proposées dans les sections précédentes pour $\langle \bar{\Phi} \rangle$ ou encore $\langle \bar{u}_3 \rangle$, les profils pour le cas DNS et LES/VOF sont également tracés. Ainsi, on s'attache dans un premier temps à décrire le comportement des profils $\langle \bar{\Sigma} \rangle$ dans le cas DNS.

Cas DNS : Dans la direction de l'axe du jet, en (a) sur ces deux figures, les profils moyens issus du formalisme DNS montrent que la densité d'interface moyenne est nulle jusqu'à $z = 5D_0$, ceci est cohérent avec le fait que cette zone correspond au cœur liquide intact. Ensuite la densité d'interface moyenne augmente rapidement pour atteindre un pic en $z = 10D_0$ tendant à confirmer que dans cette zone, sur l'axe du jet, aux alentours de 10 diamètres, le jet liquide subit un phénomène de rupture important.

Enfin, $\langle \bar{\Sigma} \rangle$ diminue jusqu'à $z = 20D_0$. Plusieurs phénomènes concourent à ce comportement de la densité d'interface moyenne. Les structures liquides issus du jet peuvent encore subir un phénomène de rupture sous l'influence de l'écoulement turbulent et du glissement de vitesse entre les phases. On compte également les interactions entre structures liquides qui peuvent contribuer à la production/destruction d'interface. A noter que la simple dispersion du spray tend globalement à faire baisser le niveau de densité d'interface moyen.

La densité d'interface moyenne observable sur les profils radiaux en $z = 5D_0$ (figures 5.34(b) et 5.35(b)) montre un comportement cohérent avec le fait que la colonne liquide subit un arrachement des structures liquides sous l'effet du cisaillement de vitesse important dans cette zone. Les profils présentent alors un pic centré sur l'interface moyenne en $r \approx 0.5D_0$. Sur les profils radiaux, en $z = 10$ et $20D_0$, on ne relève pas ce comportement et la densité d'interface moyenne présente des profils plus « lisses » qui décroissent depuis l'axes du jet en fonction du rayon, r .

On s'intéresse dans la suite aux statistiques obtenues avec le formalisme LES, tout d'abord avec la modélisation LES/VOF puis avec le modèle LES d'atomisation.

Modélisation LES/VOF : Le comportement et les niveaux de densité d'interface moyens obtenus avec le formalisme LES/VOF sont clairement inadéquates. En effet, comme cela a déjà été discuté, dans la mesure où la méthode de suivi d'interface est absolument identique à celle utilisée avec le formalisme DNS, l'ordre de grandeur de la densité d'interface que l'on peut espérer obtenir avec ce type de modélisation correspond à des échelles de l'ordre de Δ_x^{LES} , i.e. $\bar{\Sigma} \sim 1/\Delta_x^{LES}$. Ainsi, sur les cas testés avec cette modélisation, 32LES/VOF et 64LES/VOF $\Delta_x^{LES} > \Delta_x^{DNS}$, les niveaux de densité d'interface moyens sont systématiquement inférieurs à ceux obtenus en DNS. Ce que l'on peut observer sur l'ensemble des profils radiaux en comparant cette modélisation avec le cas DNS, figures 5.34 et 5.35. De plus, on note une sensibilité très marquée au

maillage, globalement les niveaux moyens de densité d'interface sur le cas 32LES/VOF sont inférieurs d'environ 50% par rapport à ceux relevés sur le cas 64LES/VOF. Ceci est à relier au fait qu'il existe un rapport deux en la taille de la maille en 32LES/VOF et celle du cas 64LES/VOF, $\Delta_x^{32LES}/\Delta_x^{64LES} = 2$.

Enfin, on peut noter que, dans l'absolu, la densité d'interface avec cette modélisation n'apporte pas vraiment d'informations supplémentaires vis-à-vis de l'interface calculée avec la méthode VOF étant donné que cette variable est extraite *a posteriori* de celle-ci. Contrairement au modèle LES d'atomisation où celle-ci est transportée.

Modèle LES d'atomisation, LESmod : En premier lieu, il convient de rappeler que l'équation de transport de la fluctuation de la densité d'interface, $\bar{\Sigma}'$, dans ce modèle a été postulée et par conséquent a nécessité un effort de modélisation relativement important (c.f. § 4.4). Nous proposons donc une première tentative et tous les points ne sont pas clairement réglés.

Par exemple, un des points abordés dans la section précédente concernait la prise en compte du phénomène de diffusion des schémas numériques dans l'expression analytique de la densité d'interface minimale, $\bar{\Sigma}_{min}$, qui ajoutée à $\bar{\Sigma}'$ permet de retrouver le champ de densité d'interface.

Un deuxième point s'est montré particulièrement sensible, il concerne le choix du nombre de Weber critique, We_{crit} , présent dans le terme source de l'équation de transport de $\bar{\Sigma}'$. On rappelle que ce nombre rend compte d'un « diamètre » critique stable pour une condition de turbulence locale donnée. Lors du développement et face au manque de donnée concernant ce point, une valeur de $We_{crit} = 1$ avait été choisie. Il se trouve que cette valeur ne semble pas tout à fait adaptée pour le modèle autorisant des niveaux trop élevés de densité d'interface.

Néanmoins, Luret *et al* [82, 83] ont montré sur des cas DNS que ce nombre pouvait osciller entre des valeurs allant de 1 à 15, selon les conditions testées. Outre le fait que cette variable dépend du rapport des masses volumiques liquide/gaz ou encore des conditions turbulentes ces auteurs montrent que le Weber critique dépend également de la fraction de volume, ce qui est un résultat attendu (c.f. discussion § 4.4.3.3). Cependant, en l'état actuel, aucune expression claire de We_c en fonction de ces paramètres n'a pu être définie, notamment considérant le nombre imposant de cas de calcul à réaliser. On se limitera donc à $We_{crit} = \text{constante}$ mais en observant l'influence de ce paramètre entre 1 et 15.

La figure 5.36 montre ainsi la sensibilité du modèle à ce nombre de Weber d'équilibre sur les moyennes, $\langle \bar{\Sigma} \rangle$, en prenant $We_{crit} = 1, 6, 10$ et 15 dans un cas $64^2 \times 512$. On observe sur ces profils que plus ce nombre est petit plus les niveaux de densité d'interface obtenus sont élevés. Ce comportement est cohérent avec le fait que le nombre de Weber critique s'exprime comme un rapport local entre l'énergie cinétique turbulente sur l'énergie de surface des structures liquides à l'équilibre contenues dans un volume de contrôle. Ainsi, pour une condition turbulente donnée, choisir un nombre Weber critique élevé impose un diamètre d'équilibre plus grand que dans le cas contraire, et par conséquent une densité d'interface plus petite. La modélisation permet de bien capter cette tendance, les conditions turbulentes étant identiques sur les différents cas

de calcul. Tendance qui se retrouve également sur un cas $32^2 \times 256$. On comprend dès lors que le choix du Weber critique est d'importance et que celui-ci conditionne grandement les niveaux moyens de densité d'interface obtenus.

Les nombreux calculs réalisés ont permis d'évaluer, pour le modèle LES, que les valeurs de ce nombre de Weber critique devaient être comprises dans une « fourchette » allant de 6 à 10. Cependant, aucune valeur n'a permis de rendre compte fidèlement de tous les niveaux moyens relevés sur les profils de la DNS, traduisant le fait que la modélisation n'est pas encore tout à fait au point.

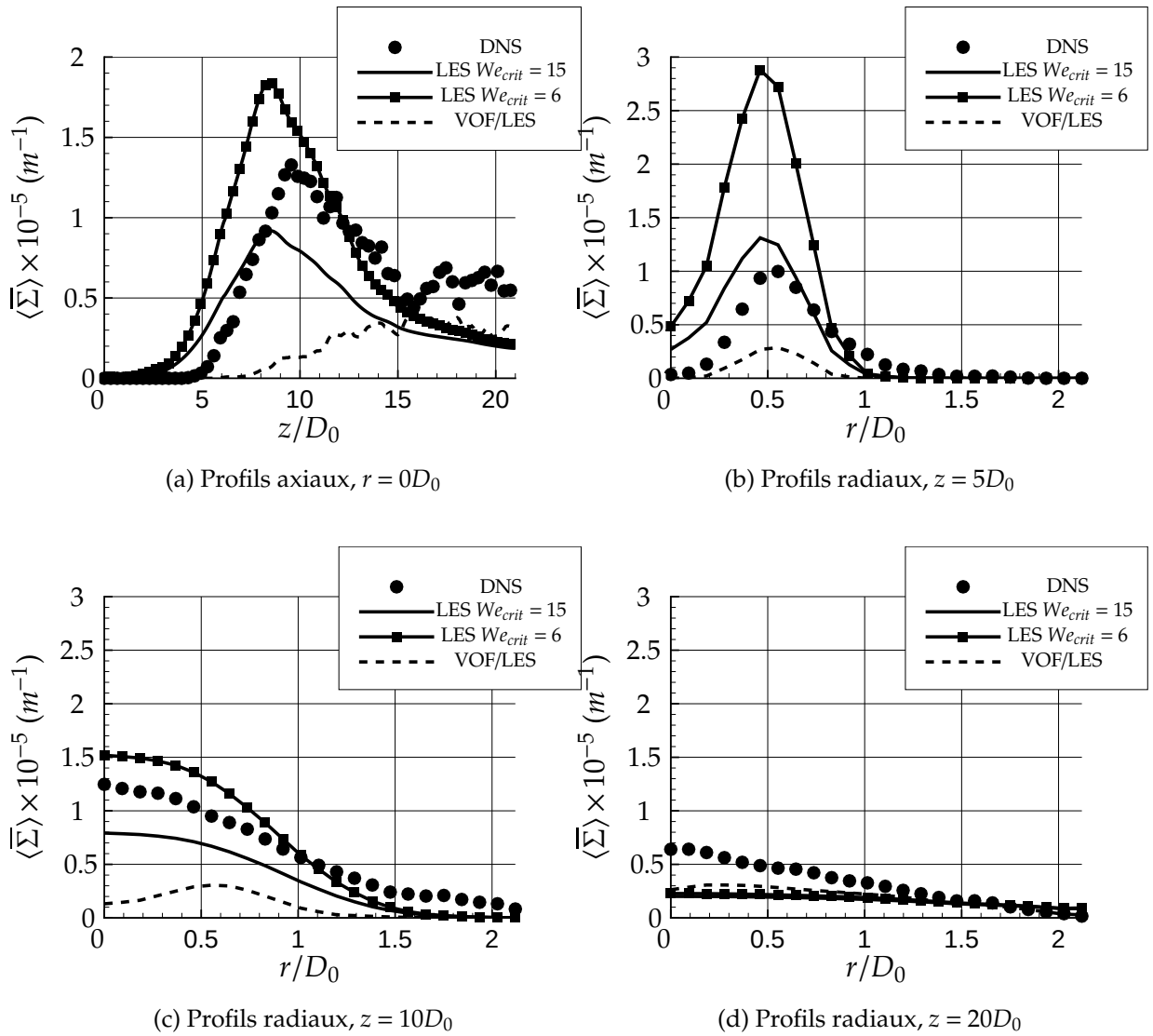
Sur le cas 64LESmod avec $We_{crit} = 6$ les profils moyens de $\langle \bar{\Sigma} \rangle$, figures 5.35, se comparent globalement bien avec le cas DNS. On notera tout de même sur le profil radial, en $z = 5D_0$ (b), le modèle surestime la quantité d'interface moyenne à cet endroit. Cela peut provenir du fait que ce cas présente un léger recul du cœur liquide intact par rapport au cas DNS. Ceci avait été mis en lumière sur les profils de fraction de volume moyen dont l'origine est probablement imputable à la diffusion numérique. On peut d'ailleurs observer sur les profils axiaux, en (a), que l'augmentation du niveau de densité d'interface intervient plus tôt. Les positions des pics se retrouvent alors sensiblement décalés.

Pour le cas 32LESmod, figure 5.35, les comparaisons sont légèrement moins bonnes qu'avec le cas 64LESmod. En outre, on note une sensibilité au maillage, à l'instar du modèle LES/VOF, toutefois moins prononcée et opposée. En effet, on peut observer que les niveaux moyens de densité d'interface obtenus avec le maillage $32^2 \times 256$ (figures 5.35) sont globalement supérieurs à ceux obtenus dans le cas $64^2 \times 512$ (5.34). Il est possible que ce comportement du modèle provienne de la diffusion numérique et d'une mauvaise estimation de $\bar{\Delta}_{WENO}$.

Il est également intéressant de constater qu'avec l'augmentation de la vitesse d'injection, V_{inj} , le modèle LES rend compte du fait que le niveau global de densité d'interface augmente pour un nombre de Weber critique fixé ($We_{crit} = 6$). Ce que l'on peut observer sur la figure 5.37, où les profils moyens sont tracés pour $V_{inj} = 100, 200$ et $400 m.s^{-1}$. Ceci est à relier à l'expression du terme source de densité d'interface $\bar{\Sigma}_{int}$ dans lequel la turbulence tient un rôle prépondérant, à travers le temps τ_b mais également dans l'expression de la densité d'interface à l'équilibre, $\bar{\Sigma}_{crit}$. Les conditions turbulentes étant plus sévères à mesure que la vitesse d'injection augmente l'atomisation devient alors plus « efficace ».

Au final, et comme cela à déjà été mentionné, un des intérêts du modèle est de disposer simultanément des champs de fraction de volume et de densité d'interface permettant ainsi d'estimer l'échelle de longueur, l_{D32} , caractéristique des structures liquides dans le domaine de calcul.

La figure 5.38 compare cette échelle, calculée pour le cas 64LESmod avec $We_{crit} = 6$, avec celle obtenue à partir des champs filtrés en DNS, avec $\bar{\Delta} = 8\Delta_x^{DNS}$ compte tenu des remarques faites sur le schéma de transport de $\bar{\Phi}$. Bien que le modèle LES n'arrive pas à reproduire dans le détail le champ DNS filtré, les niveaux de contours sont comparables. Il est donc intéressant de constater qu'en l'état, le modèle LES d'atomisation permet de retrouver dans une bonne mesure cette échelle l_{D32} .

FIGURE 5.34 – Profils de densité d'interface moyenne. Cas $32^2 \times 256$.

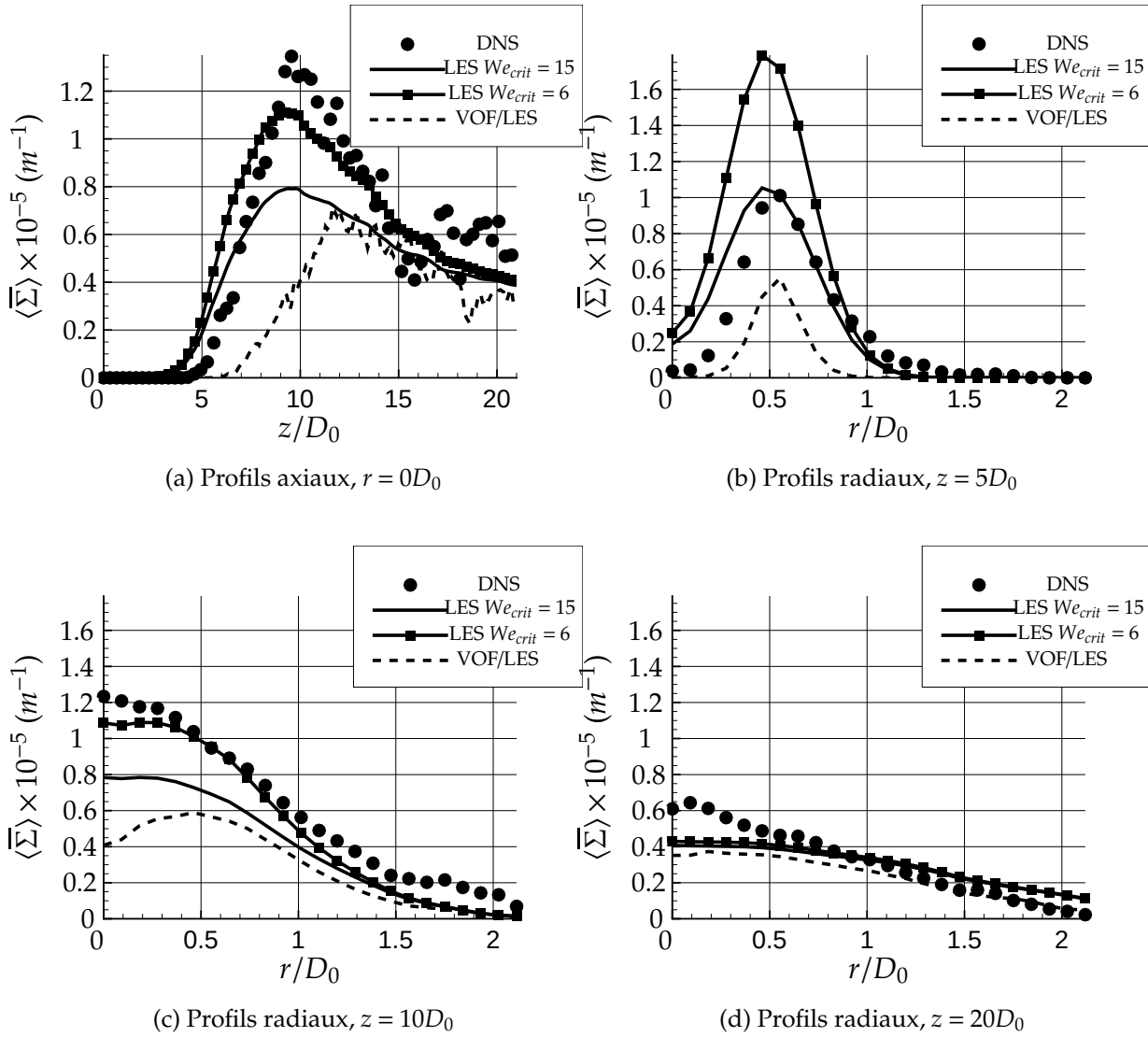


FIGURE 5.35 – Profils de densité d'interface moyenne. Cas $64^2 \times 512$.

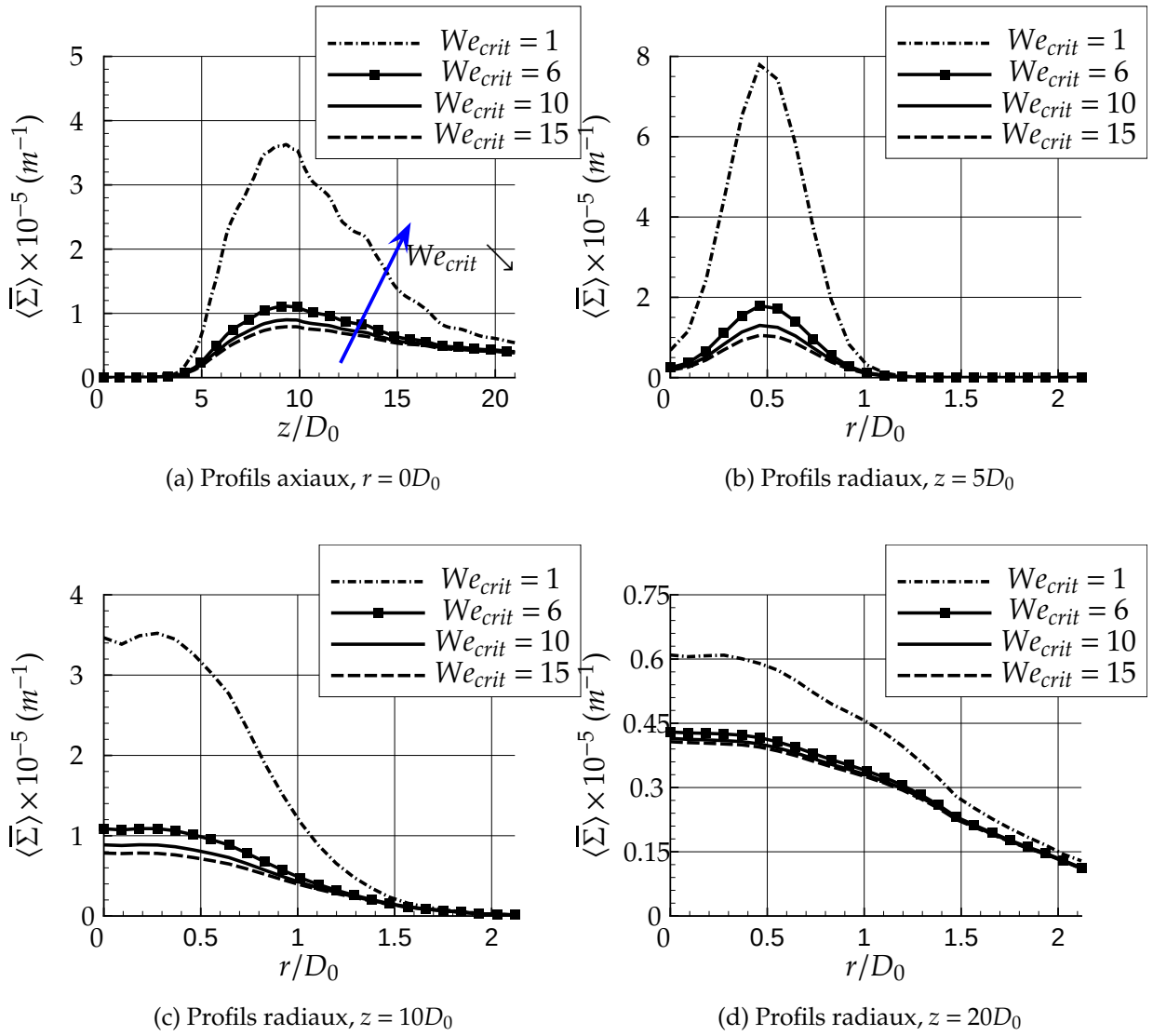


FIGURE 5.36 – Influence du Weber critique, We_c , sur les profils moyens de densité d'interface obtenus avec le modèle LES d'atomisation. Maillage $64^2 \times 512$.

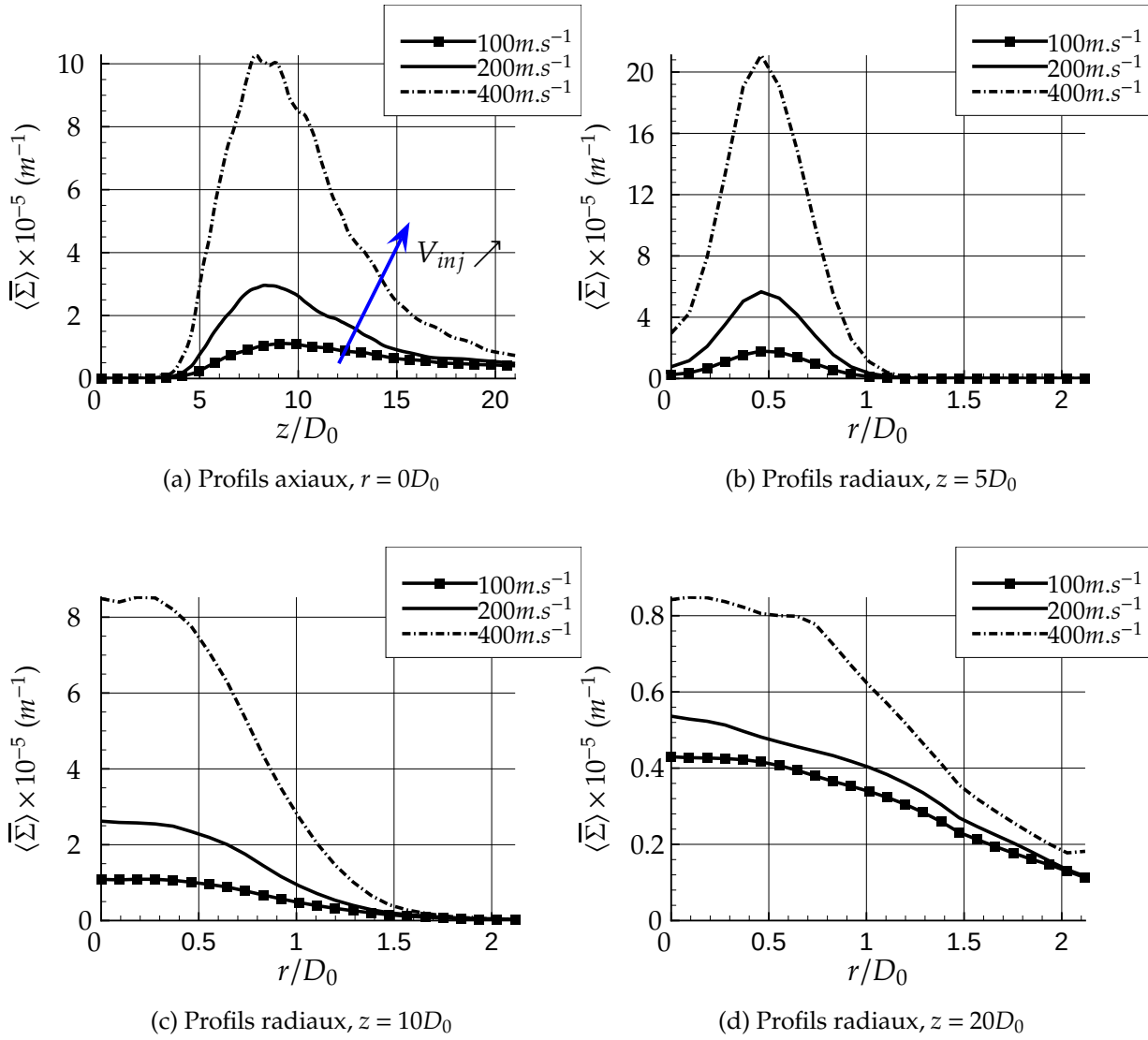


FIGURE 5.37 – Influence de la vitesse d'injection, V_{inj} , sur les profils moyens de densité d'interface obtenus avec le modèle LES d'atomisation. Maillage $64^2 \times 512$.

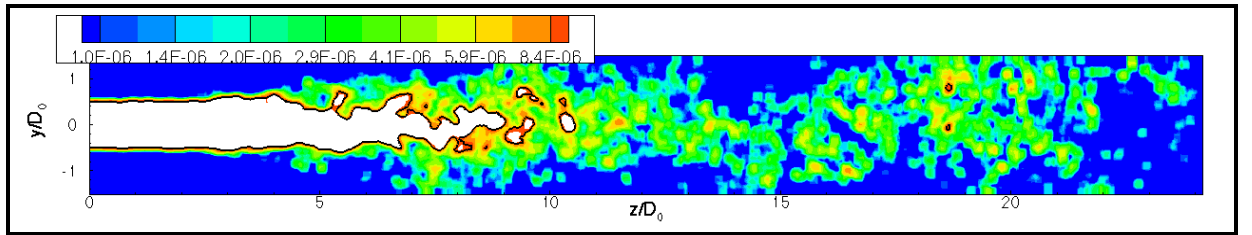
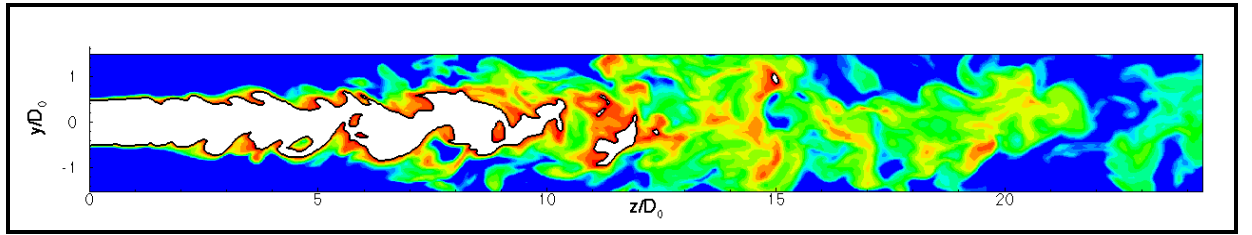
(a) $l_{D_{32}}$, DNS, $128^2 \times 1024$, $\bar{\Delta} = 8\Delta_x^{DNS}$ (b) $l_{D_{32}}$, modèle LES, $64^2 \times 512$

FIGURE 5.38 – Champ DNS instantané de l'échelle $l_{D_{32}}$ calculée, *a posteriori*, à partir de la DNS, $\bar{\Delta} = 4\Delta_x^{DNS}$ en (a). Comparaison avec un champ $l_{D_{32}}$ obtenu par le modèle LES en (b), maillage $64^2 \times 512$.

5.4 Conclusion

Ce chapitre avait pour but d'évaluer le modèle LES d'atomisation sur un cas proche de l'injection Diesel. Considérant le manque de données expérimentales dans la zone située près du nez de l'injecteur, l'outil DNS a été utilisé à des fins de comparaison. Une comparaison avec le modèle LES/VOF, dans les mêmes conditions, a également été proposée afin de savoir dans quelle mesure le modèle LES d'atomisation apportait un gain par rapport à une modélisation antérieure.

Dans un premier temps, l'étude qualitative montre que le modèle répond bien aux attentes formulées au sein du chapitre précédent, lors de son développement. À savoir, que la prise en compte du terme de sous maille de la fraction de volume permet de passer de la vision résolue de l'interface au spray de sous maille. Le modèle permet également une description de celui-ci à travers la densité d'interface, bien que son transport et les termes sources qui le composent soient entièrement postulés. En particulier, la décomposition proposée pour cette variable permet d'initier la densité d'interface, au sein du domaine de calcul, sans avoir recours à un terme spécifique d'initialisation. Cette variable permet, en outre, d'obtenir une échelle de longueur, $l_{D_{32}}$, caractéristique du spray de sous maille. Les valeurs de $l_{D_{32}}$ relevées sont de l'ordre du μm , ce qui est tout à fait compatible avec les observations expérimentales dans la zone diluée.

Dans un deuxième temps une étude quantitative a été menée. Les comparaisons se sont concentrées sur les moyennes et les écarts types temporels. Et ce, pour la fraction de volume résolue, la vitesse résolue et la densité d'interface. Cette étude montre que, globalement, le modèle LES d'atomisation apporte un gain par rapport à la modélisation LES/VOF, quelle que soit la discrétisation spatiale utilisée. De plus il a été montré que les angles moyens de spray obtenus se comparent dans une bonne mesure avec le cas DNS, pour une vitesse d'injection de $V_{inj} = 100 m.s^{-1}$. Mais également avec les modèles de Reitz *et al* [106] et Siebers [117] pour des cas où la vitesse d'injection est plus grande ($V_{inj} = 200$ et $400 m.s^{-1}$)

Cependant, cette étude quantitative a également mis à jour plusieurs problèmes, à la fois de modélisation, mais également d'ordre numérique. Concernant la modélisation, il semble que le modèle de Smagorinsky [120] ne soit pas tout à fait adapté pour rendre compte de la contributions des termes de sous maille présents dans l'équation de transport de la quantité de mouvement. Cette étude a également montré que la densité d'interface s'est révélée extrêmement sensible quant au choix du nombre Weber critique. Enfin, d'un point de vue numérique, même si le schéma WENO semble être un des plus adaptés pour le transport de la fraction de volume, celui-ci s'est révélé trop dissipatif. Et ce, malgré l'adoption d'une vision conservative.

Nous n'irons pas plus avant dans la présente conclusion car tous ces points appellent des perspectives, à plus ou moins long terme. La conclusion générale qui suit, va donc nous permettre de revenir en détail sur ceux-ci ainsi que sur les solutions envisageables pour éclaircir les zones d'ombre et tenter d'améliorer, la modélisation.

Conclusion générale & perspectives

LE PRINCIPAL objectif de la thèse consistait à développer un modèle LES capable de rendre compte des principales caractéristiques d'un écoulement liquide/gaz dans un régime d'atomisation, tels que ceux rencontrés au sein des moteurs à combustion. Et ce, depuis la zone primaire jusqu'à la phase dispersée.

Après une étude bibliographique du phénomène en question et des possibilités offertes par les modélisations actuelles, des investigations impliquant une série de tests et d'importants développements ont été menées. Finalement, la mise en œuvre de ce modèle a été réalisée et des premiers résultats ont pu être obtenus sur une configuration proche de l'injection Diesel.

On exprime donc ici les contributions du présent travail et les conclusions que nous en avons tirées, ainsi que les perspectives, à court terme puis à plus longue échéance.

Contributions

Consacré au phénomène physique, le premier chapitre a permis d'introduire les nombres sans dimensions qui caractérisent les sprays et permettent de catégoriser les différents régimes de fractionnement d'un jet liquide. Ainsi, l'injection telle qu'elle est conçue dans les moteurs à combustion interne est clairement dans un régime d'atomisation, avec des nombres de Reynolds et de Weber élevés. Les observations expérimentales révèlent ainsi que de nombreux phénomènes physiques, présentant une grande variété d'échelles temporelles et spatiales, jouent sur l'atomisation primaire (turbulence, cavitation, instabilités de surface, *etc*) et au final sur la topologie globale du spray. Bien que les détails de l'écoulement soient difficiles à atteindre, les observations montrent l'existence d'un dard liquide qui peut s'étendre de plusieurs diamètres dans la direction de l'écoulement. Outre ce dard liquide, les observations montrent également que le spray n'est pas uniquement composé d'un nuage de gouttes mais également de structures liquides complexes (tels les ligaments) qui présentent de fortes interactions entre elles et qui sont soumises au phénomène de turbulence, compte tenu du Reynolds élevé inhérent à ce type d'injection. Ce chapitre nous a donc permis de montrer qu'il apparaît primordiale d'intégrer dans un modèle de spray les différents phénomènes à l'œuvre en proche injecteur, soit en les modélisant soit en les résolvant.

Dans le second chapitre, quelques approches antérieures à ce travail et visant à modéliser un écoulement liquide/gaz en régime d'atomisation ont été détaillées. La liste de celles-ci n'est pas exhaustive et l'intérêt était principalement d'évaluer les

possibilités offertes par les différents formalismes DNS, RANS et LES dans ce contexte.

- Avec l'utilisation de méthodes spécialement consacrées au suivi d'interface, telles la méthode VOF ou encore la fonction *level-set*, il a été vu que la DNS constituait un formalisme capable de simuler une atomisation primaire, on rappelle par exemple les travaux de Ménard *et al* [90, 91]. Mais le coût numérique important de ce formalisme restreint son utilisation à de petits domaines de calcul et des géométries relativement simples. Simuler la totalité d'un spray qui peut aller jusqu'à plusieurs centaines de diamètres est difficilement envisageable. Cependant, moyennant des algorithmes précis et considérant le fait que la DNS ne requiert pas de modélisation, ce formalisme permet une compréhension accrue du phénomène et peut avoir valeur de point de comparaison pour les modèles RANS ou LES. Propriété dont nous nous sommes servi dans les chapitres suivants.

- En RANS l'interface liquide/gaz ne peut être explicitement prise en compte et les modèles d'atomisation sont principalement basés sur une approche phénoménologique du problème pour prendre en compte la zone primaire d'atomisation.

Ainsi, les modèles WAVE [105] et ELSA [129, 130] ont été détaillés. Ces deux modèles diffèrent par le fait que, dans le premier, les auteurs considèrent que ce sont les instabilités de Rayleigh-Taylor qui pilotent l'atomisation primaire alors que, dans le second, les auteurs accordent un rôle majeur au phénomène de turbulence. Cependant, ces modèles, pour des raisons différentes, doivent être adaptés en fonction de la géométrie ou du point de fonctionnement de l'injecteur [97, 26].

- En LES, peu de méthodes spécifiquement dédiées à l'atomisation primaire ont, à notre connaissance, été développées. La littérature révèle néanmoins l'existence d'études basées sur une méthodologie quasi-identique [23, 39, 14], consistant à utiliser les méthodes de suivi d'interface développées en DNS et de modéliser la turbulence par un modèle classiquement utilisé en LES monophasique (*i.e.* Smagorinsky [120]). Les résultats ont montré un fort potentiel du formalisme LES à décrire le phénomène d'atomisation primaire, notamment les premières instabilités de la colonne liquide. Cependant, les auteurs notent que les méthodes explicites de suivi d'interface empêchent clairement la description des structures ayant une taille inférieure à celle de la maille. Ils s'accordent donc sur le fait que les résultats dépendent de la résolution du maillage utilisé et que des investigations plus profondes sont nécessaires.

Le travail détaillé dans le troisième chapitre constitue une étude préliminaire au développement du modèle LES d'atomisation. En outre, l'objectif était principalement de savoir quel type de modélisation de sous maille était utilisable dans le cadre de l'atomisation liquide/gaz. Ainsi, après avoir rappelé les notions et les hypothèses qui sous tendent au formalisme LES, il a été mis en évidence que la considération d'un écoulement liquide/gaz induisait l'apparition de termes de sous maille supplémentaires sur les équations de transport par rapport au cas purement monophasique. Des tests *a priori* ont ensuite été menés à partir de données DNS d'un jet d'atomisation afin, d'une part, d'étudier le comportement de ces termes et d'en obtenir une modélisation d'autre part. En premier lieu, une étude des grandeurs turbulentes obtenues à partir du jet

DNS a été réalisée. Celle-ci a permis d'identifier trois zones d'étude aux caractéristiques turbulentes différentes, depuis la sortie de l'injecteur qui présente un profil très inhomogène (notamment à cause de la présence d'une couche de cisaillement de vitesse au niveaux de l'interface) jusqu'à une zone atomisée, plus homogène. La hiérarchisation des termes de sous maille a montré, concernant l'équation des moments, que la contribution de sous maille des termes convectif et interfacial était négligeables devant celles des termes temporel et convectif. Il a également été montré que le terme de sous maille présent dans l'équation de la fonction de phase ne pouvait être négligé par rapport à la contribution résolue. Enfin, ces tests de sous maille ont permis d'évaluer deux modélisations pour rendre compte de l'effet de ces différents termes, à savoir le modèle de Smagorinsky [120] (dynamique [75] ou non) et celui de similarité des échelles [3]. Dans le cadre de ces tests et en se basant sur les critères que nous nous sommes définis, ce dernier modèle s'est montré plus apte à reproduire les contributions de sous maille que celui de Smagorinsky, et ce dans toutes les zones d'étude et pour toutes les directions testées. Cependant, Nous avons souligné les limites des études des modèles à partir de tests *a priori*. En particulier, les comparaisons instantanées ne permettent pas d'émettre de conclusions définitives.

Le chapitre quatre présente les étapes du développement du modèle LES d'atomisation. Basé sur les résultats obtenus avec les tests de sous maille, les observations réalisées sur le cas DNS et les conclusions des études antérieures en LES d'atomisation [23, 39, 14], nous avons pu définir les objectifs de notre modèle. Ainsi, l'idée était de disposer d'un modèle LES capable de passer continument d'une description résolue de l'interface avec prise en compte de la tension de surface et des sauts de grandeurs physiques, lorsque que les échelles le permettent, à une description moyenne du spray au sein de chaque maille de calcul, dans le cas contraire. C'est-à-dire lorsque les échelles des plus petites inclusions de l'interface ne peuvent plus être résolues par la discrétisation spatiale. Dans ce dernier cas, nous avons utilisé la notion de spray de sous maille. Concernant spécifiquement ce point, il a été montré que c'est la prise en compte du terme de sous maille de la fonction de phase qui permettait la transition de la vision de l'interface résolue au spray de sous maille. Même si ce terme est faible il assure, par un processus similaire à de la diffusion, la dispersion du liquide en sous maille.

Afin d'obtenir des informations topologiques sur le spray de sous maille, le modèle propose de transporter une variable supplémentaire, à savoir la densité d'interface, $\bar{\Sigma}$. Son intérêt est de s'affranchir de l'hypothèse de gouttes sphériques tout en permettant d'obtenir une échelle caractéristique du spray de sous maille que l'on peut rapprocher du diamètre moyen de Sauter D_{32} . La forme de l'équation de transport de cette variable a été postulée en s'inspirant de travaux antérieurs [129, 130, 67], issus du formalisme RANS. Des adaptations ont cependant été pratiquées sur celles-ci pour prendre en compte l'aspect LES, notamment au niveau des termes sources de la densité d'interface. En outre, nous avons proposé une décomposition originale de la densité d'interface permettant de s'affranchir du terme source d'initialisation, souvent problématique, en ne transportant que la fluctuation de cette variable, $\bar{\Sigma}'$. L'outil DNS a une fois de plus été mis à contribution afin de trouver une expression analytique de la partie minimale

de cette décomposition, $\bar{\Sigma}_{min}$, correspondant à la quantité d'interface résolue que l'on peut calculer en chaque maille à partir du champ de fraction de volume résolue, $\bar{\Phi}$.

Enfin, les aspects numériques ainsi que la mise en œuvre de ce modèle dans un solveur Navier-Stokes diphasique (nommé ARCHER [90, 91]) ont également été abordés dans ce chapitre. En particulier, les principales difficultés étaient de prendre en compte la tension de surface et les sauts à travers l'interface résolue. Pour ce faire, nous avons tiré parti des méthodes *level-set* et GFM déjà présentes dans le solveur, en modifiant toutefois l'algorithme de ré-initialisation.

Le dernier chapitre présente les premiers résultats obtenus. L'objectif principal de celui-ci était d'évaluer la potentialité du modèle LES à rendre compte des principales caractéristiques d'un écoulement liquide/gaz dans un régime d'atomisation. Pour ce faire, et face au manque de données expérimentales dans la zone proche injecteur, l'outil DNS a été utilisé pour comparer les résultats obtenus. De plus, une comparaison avec une modélisation LES antérieure (LES/VOF) a également été proposée afin d'observer dans quelle mesure la nouvelle modélisation développée dans ce mémoire apportait un gain. Dans un premier temps, une étude du comportement qualitatif du modèle sur un cas type a été réalisée afin de savoir si les objectifs et l'idée générale du modèle étaient respectés. Ainsi les coupes à différents pas de temps, t , des principales variables du modèle nous permettent ici de réaliser un bilan concernant le comportement du modèle d'atomisation :

- En premier lieu, il est important de retenir que c'est la diffusion du champ de fraction de volume $\bar{\Phi}$, théoriquement contrôlée par le terme de sous maille, τ_{Φ_i} , qui permet l'apparition du spray de sous maille. Le modèle d'atomisation a été construit en ce sens comme cela a été détaillé dans le chapitre 4 et de ce point de vue il répond, au moins de manière qualitative, aux attentes imposées lors de son développement.
- Le transport de la densité d'interface permet bien, quant à lui, d'obtenir une description du spray de sous maille. En outre, la méthode de décomposition proposée permet bien de générer de la quantité d'interface sans pour autant avoir recourt à un terme d'initialisation particulier ou en jouant sur les conditions aux limites du domaine. L'analyse du comportement du terme source de la densité d'interface montre que les zones où le taux de turbulence est fort sont à l'origine de la fragmentation du spray de sous maille, ceci s'exprimant par une augmentation locale de la densité d'interface.
- Enfin, la connaissance simultanée de la fraction de volume et de la densité d'interface permet de reconstruire une échelle de longueur $l_{D_{32}}$ que l'on peut globalement rapprocher du diamètre moyen de Sauter pour des gouttes, D_{32} . Cette échelle montre, en première approximation, un comportement cohérent avec celui que l'on attendrait de gouttes dans un spray en atomisation. En outre, les champs montrent que les structures liquides résolues génèrent un spray de sous maille dont les échelles caractéristiques initiales sont proches de la taille de la maille LES. À mesure que l'on s'éloigne de la buse d'injection, le spray de sous maille se fragmente encore, ceci se traduisant par une diminution globale de l'échelle, $l_{D_{32}}$.

Ensuite, le modèle a été caractérisé de manière quantitative par rapport au cas

DNS, en comparant les profils axiaux et radiaux des moyennes et des écarts types des principales variables du modèle. À savoir la fraction de volume, $\bar{\Phi}$, la vitesse axiale, $\bar{u}_3$ et la densité d'interface, $\bar{\Sigma}$. Deux maillages différents ont été testés en LES afin d'estimer l'impact de la résolution sur les résultats du modèle. Et enfin, nous avons fait varier la vitesse d'injection de $V_{inj} = 100 m.s^{-1}$ à $V_{inj} = 400 m.s^{-1}$ pour étudier l'impact de ce paramètre sur les angles de spray et la quantité d'interface du spray de sous maille.

La dispersion moyenne de liquide obtenue avec le modèle LES affiche un bon comportement par rapport à la DNS. Les moyennes et les écarts types de fraction de volume résolue se comparent dans une bonne mesure aux résultats DNS, et ce sur les deux maillages testés. Les angles de sprays obtenus avec le modèle LES se comparent également bien avec le cas DNS ou encore le modèle théorique de Reitz *et al* [106]. Concernant la densité d'interface, les tendances observées sont encourageantes et sont, dans tous les cas, meilleures que celles relevées pour la modélisation LES/VOF. Le modèle peut alors rendre compte d'échelles de structures liquides de l'ordre de $1.10^{-6} m$ qui se comparent bien à celles obtenues en DNS ou encore expérimentalement dans les sprays.

D'une manière générale, le modèle LES apporte donc une nette amélioration par rapport à la modélisation LES/VOF, où les comparaisons sont moins bonnes et où le maillage influe plus sur les résultats obtenus. Néanmoins, ces comparaisons quantitatives ont mis à jour des problèmes à la fois d'ordre numérique et de modélisation. Ces points doivent être étudiés plus profondément, ils s'inscrivent donc dans les perspectives de ce travail, à plus ou moins court terme.

Perspectives

- Le schéma de transport de la fraction de volume résolue, $\bar{\Phi}$, s'est révélé trop dissipatif malgré un ordre de convergence élevé : Il ne permet pas au modèle de maintenir des profils réellement discontinus dans les zones où l'interface devrait en théorie être bien résolue. Bien que le champ de fraction de volume résolue soit peu affecté, cela impacte la topologie des structures résolues et provoque également l'apparition d'une trop grande quantité de spray de sous maille. Cependant, les différents tests ont montré que les schémas de la classe WENO, originellement utilisés dans les écoulements compressibles, étaient, parmi ceux disponibles, les plus adaptés au problème.

Malgré une légère amélioration apportée en adoptant une vision conservative, le problème reste entier et devra être réglé si l'on souhaite décrire plus fidèlement la phase dispersée ainsi que l'interface résolue. Pour ce faire, plusieurs solutions sont tout de même envisageables, par exemple coupler l'approche VOF avec un schéma de type WENO. Utiliser une approche antidiffusive [142] pour les schémas de transport semble également possible. Enfin, on peut souligner les approches utilisant des marqueurs Lagrangiens [133], mais les méthodes sont encore en cours de développement.

Dans tous les cas, un critère devra être défini afin d'estimer si l'interface est

bien résolue ou si l'on a plutôt à faire au spray de sous maille. Dans une première approche le gradient de $\bar{\Phi}$ pourrait être utilisé, mais on peut également imaginer utiliser la densité d'interface. La comparaison de cette variable avec la densité d'interface minimale indiquerait alors que l'on se trouve dans un cas ou dans l'autre.

- Du point de vue de la modélisation, l'étude des écarts types montre que la modélisation des termes de sous maille de l'équation de transport peut être encore améliorée. En outre, le modèle de Smagorinsky [120] a été utilisé pour palier aux instabilités numériques observées avec le modèle de similarité d'échelles pour l'équation de la quantité de mouvement. Pourtant, ce dernier modèle s'était montré plus à même de rendre compte des effets des termes de sous maille sur l'étude *a priori*. Il faudrait sur ce point clairement comprendre le phénomène à l'origine des instabilités numériques afin d'établir si, oui ou non, le modèle de similarité d'échelle permet d'améliorer ce point.

Dans la mesure où nous disposons des deux formalismes, DNS et LES, au sein du même solveur, une solution pourrait être de mener des études *a priori* de façon « dynamique » plutôt que statique (*i.e.* à un instant t). Inclure, à chaque pas de temps, les modèles calculés de façon *a priori* de la simulation DNS vers la simulation LES pourrait permettre d'observer si un modèle donné comporte un « biais » systématique induisant un comportement instable dans le temps. Cette solution est attractive mais nécessite vraisemblablement une mise en œuvre difficile et relativement complexe.

Notons également que beaucoup d'autres modélisations de sous maille existent et que toutes n'ont pas pu être testées. Il est par exemple possible qu'un modèle mixte Smagorinsky/similarité d'échelles puisse être un compromis en assurant stabilité et une meilleure description des effets de sous maille.

- Enfin, concernant la densité d'interface résolue, de nombreux aspects peuvent être améliorés. En particulier, les tests ont révélés que le choix du Weber critique était important et que celui-ci conditionne grandement le niveau moyen de densité d'interface. Seules des études approfondies, telle que celle proposé par Luret *et al* [83], pourront nous permettre d'améliorer ce point de modélisation.

À plus long terme, le phénomène d'évaporation devra être pris en compte. Des équations de transport supplémentaires devront alors être prises en compte (énergie, fraction de fuel évaporé, *etc*) et devront être munies des modélisations de sous maille associées. Compte tenu de la finesse de la couche limite thermique proche de l'interface liquide/gaz, déjà difficile à prendre en compte en DNS [125], celle-ci ne pourra vraisemblablement pas être résolue en LES. Dans ces conditions, le terme source d'évaporation de la fraction de fuel va également requérir une modélisation. Il faudra également prendre en compte la régression de l'interface résolue, du fait de la perte de masse de liquide. Et dans la mesure où l'évaporation influe sur la quantité d'interface, un nouveau terme source à modéliser devra faire son apparition dans l'équation de transport de cette variable.

Une deuxième perspective ouverte par les présents travaux est le couplage du modèle LES d'atomisation, développé dans un formalisme Eulérien, avec le formalisme

Lagrangien lorsque le spray est dispersé, comme cela a, par exemple, déjà été pratiqué pour le modèle ESLA en RANS. Cette association est envisageable car le modèle est déjà en mesure de fournir une échelle de longueur $l_{D_{32}}$ représentative du spray de sous maille. Or, les modèles LES Lagrangiens en phase dispersée sont nombreux et bénéficient d'une maturité qui pourrait permettre de conduire des calculs sur plusieurs centaines de diamètres de jets, tout en prenant en compte l'atomisation primaire.

Finalement, notons qu'il serait également possible d'utiliser des calculs menés au sein même de l'injecteur afin de prendre en compte l'écoulement dans la buse, le plus simple étant de raccorder les conditions aux limites des deux calculs. Cette dernière perspective, associée à celles précédemment exprimées, laisse alors entrevoir, même si ce n'est pas dans un avenir immédiat, un puissant outil de prédiction permettant d'améliorer, encore, le processus de combustion dans les moteurs.

Appendices

Annexe A

Schémas WENO pour le transport d'un scalaire

Dans cette annexe on décrit le schéma WENO d'ordre 5 qui a été utilisé pour la discrétisation du terme de convection dans l'équation de transport de la fraction de volume. Notons que la formulation initiale peut être trouvée dans les travaux de Jiang *et al* [52], on se propose de la détailler ici.

Associés à un schéma d'intégration temporel d'ordre élevé tel Runge-Kutta (d'ordre 3 ou 4), les schémas de type WENO permettent de trouver une solution numérique approchée de l'équation de transport d'un scalaire quelconque Φ , qui constitue alors une équation aux dérivées partielles hyperbolique du premier ordre. On écrit celle ci :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{\partial u_i \Phi}{\partial x_i} = 0 , \quad (\text{A.1})$$

avec u_i la composante de vitesse dans la direction i . Pour le problème qui nous intéresse on se limitera ici à une dimension, notée x , si bien que l'on cherche à résoudre l'équation suivante :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{\partial u \Phi}{\partial x} = 0 , \quad (\text{A.2})$$

Par soucis de simplicité on utilisera un domaine de calcul discrétisé spatialement sur un maillage régulier. Le pas d'espace Δ_x est par conséquent de longueur constante. On cherche la dérivée du terme convectif, en un point i de la discrétisation. l'équation A.2 peut être réécrite sous la forme semi discrétisée suivante :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t}|_i = -\frac{1}{\Delta_x} (\widehat{f}_{i+1/2} - \widehat{f}_{i-1/2}) , \quad (\text{A.3})$$

où $\widehat{f}_{i+1/2}$ est l'approximation numérique du flux de Φ en $x_{i+1/2}$: $(u\Phi)|_{i+1/2}$. Pour plus de stabilité ce flux, $\widehat{f}$, est généralement scindé en deux parties : $\widehat{f}^+$ et $\widehat{f}^-$. On utilisera alors l'une ou l'autre approximation selon le signe local de la vitesse de transport, u , ainsi pour $\widehat{f}_{i+1/2}$, il vient :

$$\begin{cases} \text{si } u_{i+1/2} > 0 \text{ alors } \widehat{f}_{i+1/2} = \widehat{f}_{i+1/2}^+ , \\ \text{si } u_{i+1/2} < 0 \text{ alors } \widehat{f}_{i+1/2} = \widehat{f}_{i+1/2}^- . \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

Les schémas WENO cherchent à obtenir une approximation de $\widehat{f}_{i+1/2}^+$ en utilisant un polynôme d'interpolation sur un certain nombre de *stencils* candidats qui se chevauchent, chacun contenant r points du maillage. Le plus décentré en amont va des points $(i-r+1)$ à i , alors que le plus aval va de i à $(i+r-1)$, les autres candidats se situent entre les deux. Cette configuration est visible figure A.1, pour le cas où $r = 3$. À ce point on peut noter que les positions de l'ensemble des candidats ne sont pas symétriques autour du point d'intérêt, $i+1/2$, on parle alors, dans ce cas précis, de configuration « biaisée » à gauche.

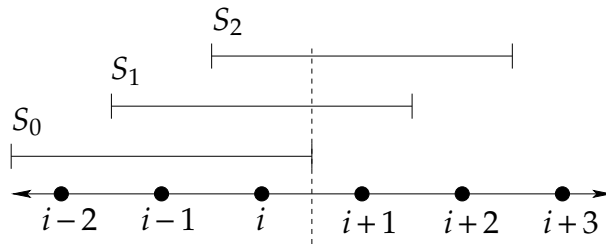


FIGURE A.1 – *Stencils* S_k candidats pour le calcul du flux $\widehat{f}_{i+1/2}^+$, avec $r = 3$ pour la méthode WENO de Jiang *et al* [52]

Si on note q_k^r l'approximation du flux sur le stencil k et ω_k la pondération de celui-ci, on écrit alors le flux recherché, $\widehat{f}_{i+1/2}^+$ comme :

$$\widehat{f}_{i+1/2}^+ = \sum_{k=0}^{r-1} \omega_k q_k^r . \quad (\text{A.5})$$

Formellement, les différents q_k^r sont des polynômes d'interpolation d'ordre r évalués comme :

$$q_k^r|_{i+1/2} = \sum_{l=0}^{r-1} a_{kl}^r f_{i-r+k+l+1} , \quad (\text{A.6})$$

où a_{kl}^r sont les coefficients du *stencil* k . Les poids des différents *stencils* sont exprimés comme :

$$\omega_k = \frac{\alpha_k}{\sum_{k=0}^{r-1} \alpha_k} , \quad (\text{A.7})$$

avec :

$$\alpha_k = \frac{C_k^r}{(\varepsilon + IS_k)^p} , \quad (\text{A.8})$$

où C_k^r sont de nouveaux coefficients. ε est une constante qui évite la division par 0 et p peut être modifié pour régler la sensibilité du schéma WENO. IS_k , quant à lui, est

un indicateur de régularité (*Smoothness Indicator*), construit pour devenir grand par rapport à C_k^r lorsqu'une discontinuité est détectée dans le *stencil* k , si bien que le poids ω_k devient minimal dans ce cas. Dans le cas contraire cet indicateur reste relativement faible. Lorsque $r \leq 4$, cet indicateur peut être exprimé comme suit :

$$IS_k = \sum_{m=1}^{r-1} \left(\sum_{l=0}^{r-1} d_{kml}^r f_{i-r+k+l+1} \right)^2, \quad (\text{A.9})$$

où d_{kml}^r sont des coefficients additionnels. Notons que dans les régions où le profil de $\widehat{f}$ est régulier, chaque *stencil* est candidat, ω_k est alors égale à la valeur optimale du poids de celui-ci, C_k^r . On comprend alors que dans ce cas, et si $r = 3$, on revient à une dérivée décentrée à l'ordre 5 pour $(\partial u \Phi / \partial x)|_i$.

Le calcul de $\widehat{f}_{i+1/2}^-$ est absolument équivalent, sauf que les stencils sont, cette fois, dans une configuration « biaisée » à droite comme cela est visible sur la figure A.2. Finalement, notons que dans le cas où le nombre de dimensions est supérieur à 1, le terme convectif est obtenu en appliquant successivement la méthode pour chaque direction. Dans le travail présenté dans ce mémoire nous avons utilisé cette méthode avec $r = 3$, si bien l'ensemble des coefficients a_{kl}^r , d_{klm}^r et C_k^r est résumé au sein du tableau A.1, pour ce cas précis.

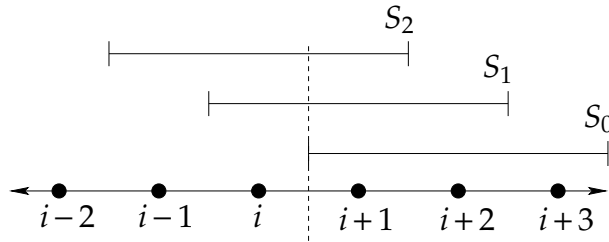


FIGURE A.2 – *Stencils* S_k candidats pour le calcul du flux $\widehat{f}_{i+1/2}^-$, avec $r = 3$ pour la méthode WENO de Jiang *et al* [52]

k	a_{kl}^3			d_{klm}^3						C_k^3
	-			$m = 1$			$m = 2$			
	$l = 0$	$l = 1$	$l = 2$	$l = 0$	$l = 1$	$l = 2$	$l = 0$	$l = 1$	$l = 2$	
0	2/6	-7/6	11/6	1/2	-4/2	3/2	β	-2β	β	1/10
1	-1/6	5/6	2/6	-1/2	0	1/2	β	-2β	β	6/10
2	2/6	5/6	-1/6	-3/2	4/2	-1/2	β	-2β	β	3/10
3	11/6	-7/6	2/6	-5/2	8/2	-3/2	β	-2β	β	N/A

TABLE A.1 – Coefficients a_{kl}^r , d_{klm}^r et C_k^r pour un nombre de *stencils*, $r = 3$. $\beta = \sqrt{13/12}$.

Annexe B

PDF jointe et moyenne conditionnée

Dans la section 4.4.4.3 est tracée la moyenne conditionnée $\langle \Sigma \mid \Phi = \Phi' \rangle$. On détaille ici comment elle est obtenue à partir de la PDF jointe de Φ et Σ : $f_{\Sigma\Phi}$.

Rappels sur les PDF jointes

Soit Σ et Φ deux variables quelconques, la PDF jointe, $f_{\Sigma\Phi}$ de Σ et Φ , est définie dans le cas continu telle que :

$$Pr[(\Sigma, \Phi) \in D] = \int_D \int f_{\Sigma\Phi}(\Sigma', \Phi') d\Sigma' d\Phi' , \quad (B.1)$$

où $Pr[(\Phi, \Sigma) \in D]$ est la probabilité pour (Σ, Φ) d'être dans la région D . La condition de normalisation est :

$$Pr[(\Sigma, \Phi) \in \mathbb{R}^2] = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f_{\Sigma\Phi}(\Phi', \Sigma') d\Phi' d\Sigma' = 1 , \quad (B.2)$$

Moyenne conditionnée à partir d'une PDF jointe

En premier lieu et grâce aux propriétés des PDF on peut écrire :

$$f_{\Sigma\Phi}(\Sigma', \Phi') = \underbrace{f_{\Sigma \mid \Phi}(\Sigma' \mid \Phi')}_1 \underbrace{f_{\Phi}(\Phi')}_2 , \quad (B.3)$$

où 1 est appelée la distribution conditionnée et 2 la distribution marginale. D'autre part, la moyenne conditionnée que l'on cherche à obtenir est :

$$\langle \Sigma \mid \Phi = \Phi' \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Sigma' f_{\Sigma \mid \Phi}(\Sigma' \mid \Phi') d\Sigma' . \quad (B.4)$$

Ainsi en multipliant B.3 par Σ' et en intégrant selon cette variable on obtient :

$$\langle \Sigma \mid \Phi = \Phi' \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Sigma' f_{\Sigma \mid \Phi}(\Sigma' \mid \Phi') d\Sigma' = \frac{1}{f_{\Phi}(\Phi')} \int_{-\infty}^{\infty} \Sigma' f_{\Sigma\Phi}(\Sigma', \Phi') d\Sigma' . \quad (B.5)$$

En remarquant que :

$$\int f_{\Sigma\Phi}(\Sigma', \Phi') d\Sigma' = f_{\Phi}(\Phi') \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} f_{\Sigma|\Phi}(\Sigma'|\Phi') d\Sigma'}_{=1} = f_{\Phi}(\Phi') , \quad (\text{B.6})$$

la moyenne conditionnée $\langle \Sigma | \Phi = \Phi' \rangle$ peut s'écrire, au final :

$$\langle \Sigma | \Phi = \Phi' \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \Sigma' f_{\Sigma\Phi}(\Sigma', \Phi') d\Sigma'}{\int_{-\infty}^{\infty} f_{\Sigma\Phi}(\Sigma', \Phi') d\Sigma'} \quad (\text{B.7})$$

Bibliographie

- [1] N. Ashgriz and J. Y. Poo. Coalescence and separation in binary collisions of liquid drops. *Journal of Fluid Mechanics Digital Archive*, 221(-1) :183–204, 1990.
- [2] P. Bailly, M. Champion, and D. Garréton. Counter-gradient diffusion in a confined turbulent premixed flame. *Physics of Fluids*, 9(3) :766–775, 1997.
- [3] J. Bardina, J.H. Ferziger, and W.C. Reynolds. Improved subgrid-scale models for large-eddy simulation. *AIAA paper-80*, 1980.
- [4] G. Batchelor. *The theory of homogeneous turbulence*. Cambridge Science Classics, 1953.
- [5] C. Baumgarten. *Mixture formation in Internal Combustion Engine*. Springer, 2006.
- [6] P.A. Beau. *Modélisation de l'atomisation d'un jet liquide - Applications aux sprays Diesel*. Thèse de doctorat, Université de Rouen, 2006.
- [7] P.A Beau, M. Funk, R. Lebas, and F.X. Demoulin. Applying quasi-multiphase model to simulate atomization processes in diesel engines : Modeling of the slip velocity. *SAE Technical Papers*, 2005. 2005-01-0220.
- [8] N. Beheshti, A. Burluka, and M. Fairweather. Assessment of Σ -yliq model predictions for air-assisted atomisation. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, 21(5) :381 – 397, 2007.
- [9] A. Berlemont and S. Tanguy. Development of a level set method for interface tracking : applications to droplet collisions. *Int. J. Multiphase Flows*, 31 :1015–1035, 2005.
- [10] J. B. Blaisot and J. Yon. Droplet size and morphology characterization for dense sprays by image processing : application to the diesel spray. *Experiments in Fluids*, 39(6) :977–994, 2005.
- [11] G. Blokkeel. *Modélisation Eulérienne du Suivi et du Fractionnement d'un Jet Liquide Injecté à Haute Pression*. Thèse de doctorat, Université de la Méditerranée Aix-Marseille II, 2003.
- [12] G. Blokkeel, R. Borghi, and Barbeau B. A 3d eulerian model to improve the primary breakup of atomizing jet. *SAE Technical Papers*, 2003. 2003-01-00005.
- [13] J.U. Brackbill, D.B. Khote, and C. Zemach. A continuum method for modelling surface tension. *J. Comput. Phys.*, 100 :335–354, 1992.
- [14] M. Buonfiglioli and F. Mendonca. LES-VOF simulation of primary diesel spray break-up with synthetic inlet perturbations. ILASS america, 2005.

- [15] W. Cai, C. F. Powell, Y. Yue, S. Narayanan, J. Wang, M. W. Tate, M. J. Renzi, A. Ercan, E. Fontes, and S. M. Gruner. Quantitative analysis of highly transient fuel sprays by time-resolved x-radiography. *Applied Physics Letters*, 83(8) :1671–1673, 2003.
- [16] S. Candel and T. Poinso. Flame stretch and the balance equation for the flame area. *Combustion Science and Technology*, 70 :1 – 15, 1990.
- [17] A. Cartellier. Measurement of gas phase characteristics using new monofiber optical probes and real-time signal processing. *Nuclear Engineering and Design*, 184(2-3) :393 – 408, 1998.
- [18] H. Chaves, C. Kirmse, and F. Obermeier. Velocity measurements of dense diesel fuel sprays in dense air. *Atomization and Sprays*, 14(6) :589–609, 2004.
- [19] E. D. Christensen. Large eddy simulation of spilling and plunging breakers. *Coastal Engineering*, 53(5-6) :463 – 485, 2006.
- [20] H. E. Cline. Marching cubes : A high resolution 3d surface construction algorithm. In *Computer Graphics*, pages 163–169, 1987.
- [21] F. Couderc. *Développement d'un code de calcul pour la simulation d'écoulements de fluides non miscibles. Application à la désintégration assistée d'un jet liquide par un courant gazeux*. Thèse de doctorat, ENSAE-Toulouse, 2007.
- [22] R. Courant, K. Friedrichs, and H. Lewy. Über die partiellen differenzengleichungen der mathematischen physik. *Mathematische Annalen*, 100(1) :32 – 74, 1928.
- [23] E. De Villier, A.D. Gosman, and H.G. Weller. Large eddy simulation of primary diesel spray atomisation. *SAE international*, 113(3) :193–206, 2004.
- [24] J. M. Delhay. Jump conditions and entropy sources in two-phase systems. local instant formulation. *International Journal of Multiphase Flow*, 1(3) :395 – 409, 1974.
- [25] J.M. Delhay. Some issues related to the modelling of interfacial areas in gas-liquid flows. CRAS, 2001.
- [26] F.X. Demoulin, P.A. Beau, G. Blokkeel, A. Mura, and R. Borghi. A new model for turbulent flows with large density fluctuations : application to liquid atomization. *Atom. and Sprays*, 17 :315–345, 2007.
- [27] D.A. Drew. Mathematical modeling of two phase flow. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 15 :261 – 291, 1983.
- [28] J.M. Duclos, D. Veynante, and T. Poinso. A comparison of flamelet models for premixed turbulent combustion. *Combustion and Flame*, 95(1-2) :101 – 117, 1993.
- [29] M.M. Elko. Fuel atomization for spray modelling. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 8(1) :61–91, 1982.
- [30] G. M. Faeth. Structure and atomization properties of dense turbulent sprays. In *Symposium (International) on Combustion, 23rd, Orleans, France, July 22-27, 1990, Proceedings (A92-16529 04-25)*. Pittsburgh, PA, Combustion Institute, 1991, p. 1345-1352., pages 1345–1352, 1991.

- [31] G. M. Faeth, L. P. Hsiang, and P. K. Wu. Structure and breakup properties of sprays. *International Journal of Multiphase Flow*, 21(Supplement 1) :99 – 127, 1995. Annual Reviews in Multiphase Flow 1995.
- [32] A. Fath, C. Fettes, and A. Leipertz. Investigation of the diesel spray break-up close to the nozzle an different injection conditions. In *The fourth International Symposium COMODIA*, 1998.
- [33] R. P. Fedkiw, T. Aslam, B. Merriman, and S. Osher. A non-oscillatory eulerian approach to interfaces in multimaterial flows (the ghost fluid method). *Journal of Computational Physics*, 152(2) :457 – 492, 1999.
- [34] L. Freret. *Developpement et optimisation d'une méthode de type gradient conjugué multigrille en calcul parallèle et application à la méthode Level-Set*. Rapport de stage DESS mathématique appliqué (CORIA), Université de Rouen, 2003.
- [35] M. Germano. Turbulence : the filtering approach. *J. Fluid Mech.*, 238 :325–336, 1992.
- [36] M. Germano, U. Piomelli, P. Moin, and W.H. Cabot. A dynamic subgride-scale eddy viscosity model. *Phy. Fluids*, 7(3) :1760–1765, 1991.
- [37] B.J. Geurts. *Elements of direct and large eddy simulation*. Edwards, 2004.
- [38] Robert Bosch GmbH. *Diesel-Speichereinspritzsystem Common Rail*, 1999.
- [39] G.M. Bianchi, F. Minelli, R. Scardovelli, and S. Zaleski. 3d large scale simulation of the high-speed liquid jet atomization. *SAE international*, 2007. 2007-01-0244.
- [40] M. Groenen. Les représentations de mains négatives dans les grottes de gargas et de tibiran (hautes-pyrénées), approche méthodologique. *Bulletin de la Société Royale Belge d'Anthropologie et de Préhistoire*, 99 :81–113, 1988.
- [41] D. Gueyffier, J. Li, A. Nadim, R. Scardovelli, and S. Zaleski. Volume-of-fluid interface tracking with smoothed surface stress methods for three-dimensional flows. *J. Comp. Phys.*, 152 :423–456, 1999.
- [42] P.D. Hieu, T Katsutoshi, and V.T. Ca. Numerical simulation of breaking waves using a two phase flow model. *appl. Math. Model.*, 28 :983–1005, 2004.
- [43] H. Hiroyasu, M. Arai, and M. Tabata. Empirical equations for the sauter mean diameter of a diesel spray. *Society of Automotive Engineers Technical Paper*, 1989. (890464).
- [44] C. W. Hirt. Heuristic stability theory for finite-difference equations. *Journal of Computational Physics*, 2(4) :339 – 355, 1968.
- [45] C.W. Hirt and B.D. Nichols. Volume of fluid (vof) - method for the dynamics of free boundaries. *J. Comput. Phys.*, 39 :201–225, 1981.
- [46] S. Idlahcen, J.-B. Blaisot, T. Girasole, C. Rozé, and L. Méès. Ultra-fast time gated images of a high pressure spray. In *14th Int Symp on Applications of Laser Techniques to Fluid Mechanics*, 2008.
- [47] S. Idlahcen, L. Méès, C. Rozé, T. Girasole, and J.-B. Blaisot. Time gate, optical layout, and wavelength effects on ballistic imaging. *J. Opt. Soc. Am. A*, 26(9) :1995–2004, 2009.

- [48] M. Ishii. *Thermo-fluid dynamic theory of two-phase flow*. Eyrolles, 1975.
- [49] A. Iyer and J. Abraham. An evaluation of a two-fluid eulerian-liquid eulerian-gas model for diesel sprays. *J. Fluids Eng.*, 25 :660–669, 2003.
- [50] A. Iyer, J. Abraham, and V. Magi. Exploring injected droplet size effects on steady liquid penetration in a diesel spray with a two-fluid model. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 45(3) :519 – 531, 2002.
- [51] S. Jay, F. Lacas, and S. Candel. Combined surface density concepts for dense spray combustion. *Combustion and Flame*, 144(3) :558 – 577, 2006.
- [52] G.-S. Jiang and C.-W. Shu. Efficient implementation of weighted eno schemes. *Journal of Computational Physics*, 126(1) :202 – 228, 1996.
- [53] M. Kang, X. Liu, and R. Fedkiw. Boundary condition capturing method for multiphase incompressible flows. *J. Sci. Comput.*, 15 :323–360, 2000.
- [54] I. Kataoka. Local instant formulation of two-phase flow. *International Journal of Multiphase Flow*, 12(5) :745 – 758, 1986.
- [55] A. M. Kempf. Les validation from experiments. *Flow, Turbulence and Combustion*, 80 :351–373, 2008.
- [56] M. Klein, A. Sadiki, and J. Janicka. A digital filter based generation of inflow data for spatially developing direct numerical or large eddy simulations. *Journal of Computational Physics*, 186(2) :652 – 665, 2003.
- [57] G. Kocamustafaogullari and M. Ishii. Foundation of the interfacial area transport equation and its closure relations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 38(3) :481 – 493, 1995.
- [58] A.N. Kolmogorov. Local structure of turbulence in an incompressible fluid at very high reynolds numbers. *Proc. Roy. Soc. London*, 434(1890) :9 – 13, 1991. First published : 1941, *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 30-310.
- [59] E. Labourasse, D. Lacanette, A. Toutant, P. Lubin, S. Vincent, O. Lebaigue, J.-P. Caltagirone, and P. Sagaut. Towards large eddy simulation of isothermal two-phase flows : Governing equations and a priori tests. *International Journal of Multiphase Flow*, 33(1) :1 – 39, 2007.
- [60] B. Lafaurie, C. Nardone, R. Scardovelli, S. Zaleski, and G. Zanetti. Modelling merging and fragmentation in multiphase flows with surfer. *Journal of Computational Physics*, 113(1) :134 – 147, 1994.
- [61] D. Lakehal. Sub-grid scale modelling for the les of interfacial gas-liquid flows. *La Houille Blanche*, (6) :125–131, nov 2005.
- [62] J.C. Lasheras, E. Villermaux, and E.J. Hopfinger. Break-up and atomization of a round water jet by a high-speed annular air jet. *Journal of Fluid Mechanics*, 357 :351–379, February 1998.
- [63] B. E. Launder and D. B. Spalding. The numerical computation of turbulent flows. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, pages 269–289, 1990.
- [64] C.K. Law. *Combustion Physics*. Cambridge University Press, 2006.

- [65] R. Lebas. *Modélisation Eulérienne de l'Atomisation Haute Pression Influence sur la Vaporisation et la Combustion Induite*. Thèse de doctorat, Université de Rouen, 2007.
- [66] R. Lebas, G. Blokkeel, P.A. Beau, and F.X. Demoulin. Coupling vaporization model with the eulerian-lagrangian spray atomization (ELSA) model in diesel engine conditions. *SAE Technical Papers*, 2005. 2005-01-0213.
- [67] R. Lebas, T. Menard, P.A. Beau, A. Berlemont, and F.X. Demoulin. Numerical simulation of primary break-up and atomization : DNS and modelling study. *International Journal of Multiphase Flow*, 35(3) :247 – 260, 2009.
- [68] A. Leboissetier. *Simulation numérique directe de l'atomisation primaire d'un jet liquide haute vitesse*. Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie, Paris VI, 2004.
- [69] A. Leboissetier and S. Zaleski. Direct numerical simulation of the atomization of a liquid jet. In *ILASS-Europe*, September 2001.
- [70] A. H. Lefebvre. *Atomization and sprays*. CRC Press, 1989.
- [71] A. Leonard. Energy cascade in large-eddy simulations of turbulent fluid flows. In F.N. Frenkiel and R.E. Munn, editors, *Turbulent Diffusion in Environmental Pollution, Proceedings of a Symposium held at Charlottesville*, volume 18, Part 1 of *Advances in Geophysics*, pages 237 – 248. Elsevier, 1975.
- [72] S. Leonard, M. Terracol, and P. Sagaut. Commutation error in LES with time-dependent filter width. *Computers and Fluids*, 36(3) :513 – 519, 2007.
- [73] S. Leroux. *Stabilité d'un jet cylindrique - influence des fortes pressions ambiantes*. Thèse de doctorat, Université de Rouen, 1996.
- [74] S. Leroux, C. Dumouchel, and M. Ledoux. The stability curve of newtonian liquid jets. *Atomization and Sprays*, 1996.
- [75] D.K. Lilly. A proposed modification of the germano subgridscale closure method. *Phys. Fluid A*, 4 :633–635, 1992.
- [76] M. Linne, M. Paciaroni, T. Hall, and T. Parker. Ballistic imaging of the near field in a diesel spray. *Experiments in Fluids*, 40(6) :836–, 846 2006.
- [77] P. Liovic and D. Lakehal. Interface-turbulence interactions in large-scale bubbling processes. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 28(1) :127 – 144, 2007. The International Conference on Heat Transfer and Fluid Flow in Microscale (HTFFM-05), The International Conference on Heat Transfer and Fluid Flow in Microscale.
- [78] P. Liovic and D. Lakehal. Multi-physics treatment in the vicinity of arbitrarily deformable gas-liquid interfaces. *Journal of Computational Physics*, 222(2) :504 – 535, 2007.
- [79] S. Liu, C. Meneveau, and J. Katz. On the properties of similarity subgrid-scales models as deduced from measurements in a turbulent jet. *J. Fluid Mech.*, 275 :83–119, 1994.
- [80] X.-D. Liu, R. P. Fedkiw, and M. Kang. A boundary condition capturing method for poisson's equation on irregular domains. *Journal of Computational Physics*, 160(1) :151 – 178, 2000.

- [81] P. Lubin, S. Vincent, S. Abadie, and J.-P. Caltagirone. Three-dimensional large eddy simulation of air entrainment under plunging breaking waves. *Coastal Engineering*, 53(8) :631 – 655, 2006.
- [82] G. Luret. *Modélisation de l'injection et de l'atomisation avec application aux nouvelles technologies d'injection dans les moteurs automobiles*. Thèse de doctorat, Université de Rouen, 2009.
- [83] G. Luret, T. Menard, G. Blokkeel, A. Berlemont, J. Reveillon, and F. X. Demoulin. Spray interactions : Modeling of collisions/coalescence phenomena. *Atomisation and Spray Technology*, 2010. Accepted after selection at 22nd ILASS-Europe, 2008 conference, in press.
- [84] A. Mansour and N. Chigier. Dynamic behavior of liquid sheets. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 3(12) :2971–2980, 1991.
- [85] F.E. Marble and J.E. Broadwell. The coherent flame model for turbulent chemical reactions. Technical report, Project Squid Tech. Rep., 1977. TRW-9-PU.
- [86] P. Marmottant and E. Villermaux. On spray formation. *Journal of fluid mechanics*, 498 :73–111, 2004.
- [87] M. P. Martín, E. M. Taylor, M. Wu, and V. G. Weirs. A bandwidth-optimized weno scheme for the effective direct numerical simulation of compressible turbulence. *J. Comput. Phys.*, 220(1) :270–289, 2006.
- [88] L. Martinez, A. Benkenida, and B. Cuenot. A model for the injection boundary conditions in the context of 3d simulation of diesel spray : Methodology and validation. *Fuel*, 89(1) :219 – 228, 2010.
- [89] M. J. McCarthy and N. A. Molloy. Review of stability of liquid jets and the influence of nozzle design. *The Chemical Engineering Journal*, 7(1) :1 – 20, 1974.
- [90] T. Menard. *Developpement d'une methode level-set pour le suivi d'interface. Application de la rupture de jet liquide*. Thèse de doctorat, Université de Rouen, 2007.
- [91] T. Menard, S. Tanguy, and A. Berlemont. Coupling level set/vof/ghost fluid methods : Validation and application to 3d simulation of the primary break-up of a liquid jet. *International Journal of Multiphase Flow*, 33 :510–524, 2007.
- [92] C. Meneveau. Statistics of turbulence subgrid-scale stresses : Necessary conditions and experimental tests. *Physics of Fluids*, 6(2) :815–833, 1994.
- [93] C. Morel. On the surface equations in two-phase flows and reacting single-phase flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 33(10) :1045 – 1073, 2007.
- [94] C. Morel, N. Goreaud, and J.M. Delhay. The local volumetric interfacial area transport equation : derivation and physical significance. *International Journal of Multiphase Flow*, 25(6-7) :1099 – 1128, 1999.
- [95] C. L. M. H. Navier. Mémoire sur les lois du mouvement des fluides. *Mem. Acad. Sci. Inst.*, 6 :389–440, 1822.
- [96] S. Osher and J.A. Sethian. Fronts propagating with curvature-dependent speed : Algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *Journal of Computational Physics*, 79(1) :12 – 49, 1988.

- [97] M. A. Patterson and R. D. Reitz. Modeling the effects of fuel spray characteristics on diesel engine combustion and emissions. *Society of Automotive Engineers Technical Paper*, 107(3) :27–43, 1998. (980131).
- [98] U. Piomelli. Wall-layer models for large-eddy simulations. *Progress in Aerospace Sciences*, 44(6) :437 – 446, 2008. Large Eddy Simulation - Current Capabilities and Areas of Needed Research.
- [99] J. Plateau. *Statique expérimentale et théorique des liquides soumis aux seules forces moléculaires*. Gauthier-Villars, 1873.
- [100] S. B. Pope. The evolution of surfaces in turbulence. *International Journal of Engineering Science*, 26(5) :445 – 469, 1988.
- [101] S. B. Pope. *Turbulent flows*. Cambridge University Press, 2000.
- [102] Lord Rayleigh. On The Instability Of Jets. *Proc. London Math. Soc.*, s1-10(1) :4–13, 1878.
- [103] S. Reboux, P. Sagaut, and D. Lakehal. Large-eddy simulation of sheared interfacial flow. *Physics of Fluids*, 18(10) :105105, 2006.
- [104] R. D. Reitz. *Atomization and other break-up regimes of a liquid jet*. PhD thesis, Princeton University, 1978.
- [105] R. D. Reitz. Modeling atomization processes in high-pressure vaporizing sprays. *J. Atomization Spray Tech.*, 3 :309, 1987.
- [106] R. D. Reitz and F. V. Bracco. Mechanism of atomization of a liquid jet. *Physics of Fluids*, 25(10) :1730–1742, 1982.
- [107] R.D. Reitz and R. Diwakar. Structure of high-pressure fuel sprays. *Society of Automotive Engineers Technical Paper*, 96(5) :492–509, 1987. (870598).
- [108] W. Reynolds. *The potential and limitations of direct and large eddy simulations*, chapter Whither Turbulence? Turbulence at the Crossroads, pages 313–343. Springer Berlin / Heidelberg, 1990.
- [109] P. Sagaut. *Large Eddy Simulation for Incompressible Flows*. Springer Verlag, 2003.
- [110] R. Saliba and J.C. Champoussin. Influence of the nozzle geometry on the cavitation and on the spray development in diesel injection. In *20th Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems (Europe)*.
- [111] K. A. Sallam and G. M. Faeth. Surface Properties During Primary Breakup of Turbulent Liquid Jets in Still Air. *AIAA Journal*, 41 :1514–1524, August 2003.
- [112] R. Scardovelli and S. Zaleski. Direct numerical simulation of free surface and interfacial flow. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 31 :567–603, 1999.
- [113] H. Schlichting, K. Gersten, E. Krause, H. Jr. Oertel, and C. Mayes. *Boundary layer theory*. 7th edition, McGraw-hill, 1979.
- [114] J. A. Sethian. *Level Set Methods and Fast Marching Methods - Evolving Interfaces in Computational Geometry, Fluid Mechanics, Computer Vision, and Materials Science*. Cambridge University Press, 1999.

- [115] C.-W. Shu and S. Osher. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes, ii. *Journal of Computational Physics*, 83(1) :32 – 78, 1989.
- [116] M. S. Sidhu and A. A. Burluka. Average vaporisation rate in turbulent subcritical two-phase flow. *Combustion Science and Technology*, 180(5) :975 – 996, 2008.
- [117] D. L. Siebers. Scaling liquid-phase fuel penetration in diesel sprays based on mixing-limited vaporization. *SAE Technical Papers*, 1999. 1999-01-0528.
- [118] O. Simonin. Combustion in two-phase flows : Continuum modelling of dispersed two-phase flows, 1996. *Von Karman Institute for Fluid Dynamics, Lecture Series 1996-2002*.
- [119] W.A. Sirignano. *Fluid dynamics and Transport of droplets and sprays*. Cambridge University Press, 1999.
- [120] J. Smagorinsky. General experiments with the primitives equations. *Mon. Weather Rev.*, 63 :99–164, 1963.
- [121] M. Stahl, M. Gnirss, N. Damaschke, and C. Tropea. Laser doppler measurements of nozzle flow and optical characterisation of the generated spray. In *20th Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems (Europe)*, 2005.
- [122] D. Stepowski and O. Werquin. Measurement of the liquid volume fraction and its statistical distribution in the near development field of a spray. *Atomization and Sprays*, 14 :3–25, 2004.
- [123] A. M. Sterling and C. A. Sleicher. The instability of capillary jets. *Journal of Fluid Mechanics Digital Archive*, 68(03) :477–495, 1975.
- [124] M. Sussman, P. Smereka, and S. Osher. A level-set approach for computing solution to incompressible two phase flow. *J. Comp. Phys.*, 114 :146–159, 1994.
- [125] S. Tanguy. *Developpement d'une methode de suivi d'interface. Application aux écoulements diphasiques*. Thèse de doctorat, Université de Rouen, 2004.
- [126] A. Toutant. *Modélisation physique des interactions entre interface et turbulence*. Thèse de doctorat, INP Toulouse, 2006.
- [127] A. Toutant, E. Labourasse, O. Lebaigue, and O. Simonin. DNS of the interaction between a deformable buoyant bubble and a spatially decaying turbulence : A priori tests for les two-phase flow modelling. *Computers and Fluids*, 37(7) :877 – 886, 2008. Special Issue of the "Turbulence and Interaction-TI2006" Conference.
- [128] G. Tryggvason, B. Bunner, A. Esmaeeli, D. Juric, N. Al-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(2) :708–759, 2001.
- [129] A. Vallet. *Contribution à la Modélisation de l'Atomisation d'un Jet Liquide Haute Pression*. Thèse de doctorat, Université de Rouen, 1997.
- [130] A. Vallet, A. Burluka, and R. Borghi. Developpement of an eulerian model for the atomization of a liquid jet. *Atom. and Sprays*, 11 :619–642, 2001.
- [131] O. Vermorel, S. Richard, O. Colin, C. Angelberger, A. Benkenida, and D. Veynante. Towards the understanding of cyclic variability in a spark ignited engine using multi-cycle les. *Combustion and Flame*, 156(8) :1525 – 1541, 2009.

- [132] D. Veynante and R. Knikker. Comparison between LES results and experimental data in reacting flows. *Journal of Turbulence*, 7 :35–+, 2006.
- [133] S. Vincent, G. Balmigère, J.-P. Caltagirone, and E. Meillot. Eulerian-lagrangian multiscale methods for solving scalar equations - application to incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 229(1) :73 – 106, 2010.
- [134] S. Vincent and J.P. Caltagirone. A one cell local multigrid method for solving unsteady incompressible multiphase flow. *J. Comp. Phy.*, 163 :172–215, 2000.
- [135] S. Vincent, J. Larocque, D. Lacanette, A. Toutant, P. Lubin, and P. Sagaut. Numerical simulation of phase separation and a priori two-phase les filtering. *Computers and Fluids*, 37(7) :898 – 906, 2008. Special Issue of the "Turbulence and Interaction-TI2006" Conference.
- [136] B. Vreman, B. Geurts, and H. Kuerten. A priori tests of large eddy simulation of the compressible plane mixing layer. *Journal of Engineering Mathematics*, 29(4) :299–327, 1995.
- [137] B. Vreman, B. Geurts, and H. Kuerten. Large-eddy simulation of the temporal mixing layer using the clark model. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, 8(4) :309–324, 1996.
- [138] P. Wang, J. Fröhlich, V. Michelassi, and W. Rodi. Large-eddy simulation of variable-density turbulent axisymmetric jets. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 29(3) :654 – 664, 2008. The Fifth International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP5).
- [139] C. Weber. Zum zerfall eines flüssigkeitsstrahles. *Z. Angew. Math. Mech.*, 11(2) :136–154, 1931.
- [140] F. A. Williams. Spray combustion and atomization. *Physics of Fluids*, 1(6) :541–545, 1958.
- [141] P.-K. Wu and G. M. Faeth. Onset and end of drop formation along the surface of turbulent liquid jets in still gases. *Physics of Fluids*, 7(11) :2915–2917, 1995.
- [142] Z. Xu and C.-W. Shu. Anti-diffusive flux corrections for high order finite difference weno schemes. *Journal of Computational Physics*, 205(2) :458 – 485, 2005.
- [143] A. Yoshizawa. Statistical theory for compressible turbulent shear flows, with the application to subgrid modeling. *Physics of Fluids*, 29(7) :2152–2164, 1986.
- [144] Y. Yue, C. F. Powell, R. Poola, J. Wang, and J. K. Schaller. Quantitative measurements of diesel fuel spray characteristics in the near-nozzle region using x-ray absorption. *Atomization and Sprays*, 11(4) :471–490, 2001.