Simulation aux grandes échelles d'écoulements diphasiques turbulents à phase liquide dispersée

Aymeric Vié

▶ **To cite this version:**

Aymeric Vié. Simulation aux grandes échelles d'écoulements diphasiques turbulents à phase liquide dispersée. Mécanique des fluides [physics.class-ph]. Institut National Polytechnique de Toulouse - INPT, 2010. Français. NNT : 2010INPT0133 . tel-00620754

HAL Id: tel-00620754

https://theses.hal.science/tel-00620754v1

Submitted on 8 Sep 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.

Université de Toulouse

THESE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par *L'Institut National Polytechnique de Toulouse (INP Toulouse)*
Discipline ou spécialité : *Énergétique, Mécanique des Fluides*

Présentée et soutenue par ***Aymeric Vié***
Le ***14 décembre 2010***

Titre :

Simulation aux grandes échelles d'écoulements diphasiques turbulents à phase liquide dispersée

---

JURY

R. Fox	*Professeur à l'Université de l'Iowa (USA)*	*Rapporteur*
F. Dupoirieux	*Maitre de recherche à l'ONERA Palaiseau*	*Rapporteur*
M. Massot	*Professeur à l'École Centrale de Paris*	*Examinateur*
T. Lederlin	*Ingénieur à Turbomeca*	*Invité*
A. Benkenida	*Adjoint au directeur du CRT à IFP énergies nouvelles*	*Invité*
S. Jay	*Ingénieur de recherche à IFP énergies nouvelles*	*Invité*
B. Cuenot	*Chercheur sénior au CERFACS*	*Directrice de thèse*

Ecole doctorale : *Mécanique, Énergétique, Génie Civil et Procédés (MEGeP)*
Unité de recherche : *IFP Énergies Nouvelles*
Directrice de Thèse : *Bénédicte Cuenot*

Résumé

Les écoulements diphasiques turbulents sont présents dans de nombreux systèmes industriels (moteur à piston, turbines à gaz, moteurs fusée...). La compréhension fine de telles configurations s'avèrent de nos jours nécessaire pour limiter notamment les émissions de polluants et de gaz à effet de serre, et la consommation des énergies fossiles.

Nous nous intéressons ici à la simulation aux grandes échelles des écoulements diphasiques turbulents, permettant de capturer une large partie du spectre de la turbulence, et ainsi être capable de prédire des phénomènes instables ou transitoires. La phase dispersée est ici modélisée par une approche eulérienne, en raison de ses avantages dans le contexte du calcul haute performance.

Le travail de cette thèse a consisté à étendre le formalisme eulérien existant dans le code AVBP à la simulation de sprays polydisperses dans des écoulements turbulents. Pour cela, le Formalisme Eulérien Mésoscopique (FEM) a été couplé à une approche Multi-fluide. Cette nouvelle approche, intitulée Formalisme Eulérien Mésoscopique Multi-fluide (FEMM), a été évaluée sur des cas simples canoniques, permettant de bien caractériser le comportement autant en terme de dynamique turbulente que d'effets polydisperses. Les stratégies numériques disponibles dans le code de calcul AVBP sont aussi analysées, afin d'en cerner les limites pour la simulation eulérienne d'une phase liquide.

Ce nouveau formalisme est finalement appliqué à la configuration aéronautique MERCATO, pour laquelle on dispose de résultats numériques obtenus avec d'autres approches (FEM et approche lagrangienne), et de résultats expérimentaux. Un accord satisfaisant avec l'expérience est montré pour toutes les approches, même si le FEM, monodisperse, obtient de moins bon résultats en terme de fluctuations. D'autres résultats expérimentaux s'avèrent nécessaires pour évaluer les approches et déterminer quelle est la plus prédictive pour cette configuration, notamment concernant la fraction massique de kerosene, autant en phase liquide qu'en phase gazeuse.

Mots clés : simulation aux grandes échelles, écoulements diphasiques, formalisme eulérien mésoscopique, approche multi-fluide, configuration aéronautique, évaporation

Abstract

Turbulent two-phase flows are encountered in several industrial devices (piston engine, gas turbine, rocket engine...). A fine understanding of such configurations is mandatory to face problems of pollutant emissions, greenhouse gas, and fossil fuel rarefaction.

The Large Eddy Simulation seems to be a good candidate. This kind of simulation captures a wide part of turbulence spectrum, and thus allows to predict instabilities and transient phenomena. The dispersed phase is simulated using an Eulerian approach, which seems to be more suitable than lagrangian methods for High Performance Computing.

The present work consists in the extension to polydisperse flows of the existing eulerian formalism in the AVBP code. The Mesoscopic Eulerian Formalism (MEF) is coupled with the Multifluid approach. This new formalism, called Multifluid Mesoscopic Eulerian Formalism, is evaluated on simple test cases, showing the ability of such approach to capture turbulent and polydisperse effects. Numerical strategies available in AVBP are also evaluated, in order to emphasize on their limiting aspects for the eulerian simulation of a dispersed phase.

The new formalism is finally applied to the simulation of the aeronautical configuration called MERCATO. Several experimental results are available, as well as numerical results using FEM and lagrangian approach. Results show a good agreement between experiments and numerical results, even if FEM results are worse concerning the fluctuations. New experimental results are necessary to determine which is the best approach, especially in terms of liquid and gas kerosene mass fraction.

Keywords : large eddy simulation, two-phase flows, mesoscopic eulerian formalism, multifluid approach, aeronautical configuration, evaporation

Remerciements

Mes remerciements s'adressent d'abord à ceux qui m'ont permis de faire cette thèse, Adlène Benkenida et Bénédicte Cuenot. Adlène pour m'avoir choisi pour cette thèse et m'avoir suivi pendant ma première année de thèse. Bénédicte pour les trois années de thèse pendant lesquelles elle s'est toujours montrée disponible et impliquée malgré la distance. Ces premiers remerciements se prolongent évidemment à Stéphane Jay, qui a repris le flambeau de ma thèse pour les deux dernières années et qui a su amener ses compétences et sa sympathie pour que nous arrivions ensemble au bout de ce travail. Je ne quitterai pas ce premier paragraphe sans avoir remercié Christian Angelberger, chef de projet qui mérite surement le titre de co-directeur de ma thèse, tellement il était impliqué dans mon travail, par sa connaissance du contexte et son entrain naturel pour toute question scientifique.

Je remercie Rodney Fox et Francis Dupoirieux d'avoir accepté d'être rapporteur de mon manuscrit, autant pour les remarques sur le manuscrit que les questions pertinentes posées lors de la soutenance. Je remercie Marc Massot aussi bien pour sa présence dans le jury, que pour le travail qui a été effectué avec lui et son équipe pour la prise en main et la compréhension des modèles utilisés pendant ma thèse. Je remercie enfin Thomas Lederlin d'avoir apporté une composante industrielle à ce jury de thèse, par ces questions et ses remarques.

Passons maintenant aux remerciements des compagnons de route : les thésards de l'IFP. La liste est longue, j'en oublie certainement. Premier de cordée, Lionel. Pour m'avoir formé pendant la première année aux plaisirs insoupçonnés du diphasique eulérien (libre à chacun de juger de l'ironie de cette phrase...). Pour ses analyses économiques pertinentes ("c'est la crise"), sa bonne humeur constante. Et aussi pour son endurance (...) et ses qualités de libéro pour les foots du vendredi.

Dans la série "l'Eulérien c'est bien", Damien. Sujets proches, même encadrant IFP, bureaux côte à côte, blagues aussi nulles. Vous ajoutez un soupçon de Colorado, et un FC Metz en D2, et vous obtenez une ambiance rare faite d'un humour "border line", de questions scientifiques sérieuses, et de commentaires footballistiques totalement partisans.

Dans la série "mes blagues sont nulles", JB. Le premier à douter de la qualité de mes blagues, et le premier pour en sortir une encore plus nulle... Frustré de ne plus être thésard, il martyrise les pauvres bougres qui sont sous son aile (Pauline et Julien, courage !).

Je ne vais évidemment pas oublier Jorg, notre teuton favori (bon d'accord c'était aussi le seul, donc on fait avec). Sportif accompli, mais incapable de venir faire un foot. Maître dans l'art de la manipulation des schémas réactionnels, écho convaincant du cri du cochon, farouche adversaire au combat de sucre.

Une pensée aussi pour Zak et Sabre, qui partageaient avec moi le même bureau (comme tous les thésards d'ailleurs, l'open space soit loué), mais aussi les terrains de football le week-end pour les matchs

(régulièrement) et en semaine pour les entrainements (beaucoup moins souvent). Eux aussi étaient indubitablement de grands analystes du football moderne, notamment en ce qui concerne le PSG pour Sabre ("la magie du spectacle").

Surtout ne pas oublier Pauline, sinon elle va bouder. Reine du bon goût, aux remarques d'une féminité exaltée, qui a eu l'audace de critiquer mon vocabulaire fleuri le jour de mon pot de thèse. Finalement le grand bête a peut être pas tort de te faire souffrir...

Après les thésards, je remercie aussi l'ensemble des ingénieurs et chefs de projet de L'IFP. Je remercie notamment Chawki et Olivier C. pour les nombreuses discussions scientifiques, Benjamin et Olivier L. pour les discussions sur l'informatique de temps à autre déficiente. Et je remercie également Gilles, Fabrice et Antonio, qui ont aussi partagé avec moi les terrains de football avec l'ASIP.

Je voudrais remercier également les gens avec qui j'ai eu le plaisir de travailler à l'extérieur de l'IFP, notamment Marlène, Eléonore, Gabriel et Olivier V. du CERFACS, et Pascal, Jérome et Laurent de l'IMFT.

Je finis ces remerciements par ceux qui ont contribué au plaisir de réaliser cette thèse loin de mes terres toulousaines, à savoir mes partenaires de football et de tennis de l'ASIP. Merci notamment à Manu, Phiphi, Christian, Willy et Le Président pour la section football et à Olivier Le Coz, Julian et Ben pour la section tennis.

Table des matières

Introduction **27**

I Équations de transport d'un écoulement diphasique à phase dispersée **35**

1 Approches de modélisation d'une phase liquide dispersée **37**

1.1 Approches directes de simulation d'une phase dispersée 37

1.2 Approches statistiques 40

1.2.1 Équation de Williams-Boltzmann 40

1.2.2 Approche lagrangienne stochastique 41

1.2.3 Approches eulériennes 41

1.3 Approches eulériennes monodisperses en taille 42

1.3.1 Modèle bi-fluide 42

1.3.2 Formalisme Eulérien Mésoscopique 43

1.4 Prise en compte de la polydispersion en taille 44

1.4.1 Sampling 44

1.4.2 Fdp présumée 44

1.4.3 Approche Multi-fluide 44

1.5 Les méthodes de quadrature 45

1.5.1 Approche QMOM 46

1.5.2 Approche DQMOM 47

1.5.3 Méthode de Moments d'ordre élevé 47

1.6 Quelle approche choisir ? 48

2 Le Formalisme Eulérien Mésoscopique : extension aux écoulements polydisperses **49**

2.1 Le Formalisme Eulérien Mésoscopique 49

2.1.1 Dérivation . . . 49
2.1.2 Termes sources de traînée . . . 50
2.1.3 Modèles de fermeture des corrélations doubles et triples en vitesse . . . 50
2.1.4 Système d'équations final . . . 51
2.2 Dérivation du Formalisme Eulérien Mésoscopique Multi-fluide . . . 51
2.2.1 Termes sources de traînée . . . 53
2.2.2 Modèles de fermeture des corrélations doubles et triples en vitesse . . . 53
2.2.3 Termes sources d'évaporation . . . 54
2.2.4 Système d'équations final . . . 58
2.3 Simulation aux Grandes Echelles . . . 58
2.3.1 Equations filtrées du FEM . . . 59
2.3.2 Equations filtrées du FEMM . . . 60
2.3.3 Equations filtrées de la phase gazeuse . . . 61
2.4 Discussion générale sur les approches utilisées . . . 62
2.4.1 Prise en compte du two-way coupling . . . 62
2.4.2 Problème du conditionnement . . . 64
2.4.3 Validité des fermetures des flux décorrélés . . . 65
2.4.4 Flux décorrélé pour les moments en taille des particules dans les approches polydisperses . . . 66

II Évaluation du FEMM sur des configurations simples 69

3 Évaluation des stratégies numériques pour le calcul diphasique 73
3.1 Le code AVBP . . . 73
3.2 Schémas numériques . . . 74
3.2.1 Le schéma TTGC . . . 75
3.2.2 Le schéma PSI . . . 76
3.3 Viscosité artificielle . . . 78
3.3.1 Les senseurs . . . 78
3.4 Analyse préliminaire des senseurs de viscosité artificielle . . . 83
3.5 Evaluation en convection pure 1D . . . 84
3.5.1 Description du cas test . . . 84

3.5.2 Condition initiale gaussienne . . . 85
3.5.3 Condition initiale en créneau . . . 87
3.6 Conclusion sur le traitement numérique de la phase dispersée . . . 90

4 Validation du FEM en Turbulence Homogène Isotrope décroissante chargée 93
4.1 Turbulence Homogène Isotrope (THI) . . . 93
4.2 THI diphasique . . . 95
4.3 Influence des paramètres numériques . . . 98
4.4 Conclusions sur la THI . . . 100

5 Validation des effets de polydispersion en taille 103
5.1 Effet de traînée . . . 103
5.1.1 Paramètres du cas test . . . 103
5.1.2 Résultats . . . 103
5.2 Évaporation . . . 107
5.2.1 Description du cas test . . . 107
5.2.2 Condition initiale gaussienne . . . 108
5.2.3 Condition initiale en créneau . . . 112
5.2.4 Condition initiale bimodale . . . 115

III Application à la configuration MERCATO 121

6 Description du banc MERCATO et mise en place du calcul 125
6.1 Configuration expérimentale . . . 125
6.2 Point de fonctionnement et mesures expérimentales . . . 126
6.3 Géométrie et maillage . . . 126
6.4 Conditions aux limites . . . 128
6.5 Paramètres numériques . . . 128
6.6 Composition du kérosène et modèle d'injection FIMUR . . . 130

7 Calcul monophasique 133
7.1 Conditions du calcul . . . 133
7.2 Topologie de l'écoulement . . . 133
7.3 Validation . . . 134

7.4 Conclusions sur la modélisation de l'écoulement gazeux 136

8 Calcul diphasique **141**

8.1 Remarques préliminaires sur le comportement du multi-fluide 141

8.2 Conditions du calcul 141

8.3 Analyse de l'écoulement multi-fluide 142

8.3.1 Phase liquide totale 142

8.3.2 Analyse par section 143

8.3.3 Écoulement proche injecteur et comportement aux parois 145

8.4 Comparaison à l'expérience et aux autres approches 152

8.4.1 Fraction volumique de liquide 152

8.4.2 Vitesses moyennes 152

8.4.3 Fluctuations de vitesse 153

8.4.4 Distributions de taille de gouttes 161

8.4.5 Statistiques par section 161

8.4.6 Diamètre moyen 162

8.4.7 Flux volumique de gouttes et fraction massique de kérosène 169

8.5 Conclusions 172

Conclusions et perspectives **173**

Bibliographie **186**

ANNEXES **187**

A Performances de AVBP multiclasse **189**

B Modèles de trainée et d'évaporation **193**

B.1 Forces extérieures 193

B.2 Évaporation 196

C Publications **201**

Table des figures

1 Répartition des émissions de gaz à effet de serre en fonction des activités humaines (GIEC [2007]). 27

2 Exemple de simulation système d'un moteur Diesel HCCI (www.ifp.fr). 29

3 Simulation LES multicycles du moteur XU10 de PSA (gauche, Vermorel et al. [2009]) et d'un moteur multicylindres à allumage commandé (droite, Laget et al. [2011]). . . . 29

4 Simulation VOF/Level set/Ghost Fluid de l'atomisation d'un jet liquide de type Diesel (Ménard et al. [2007]). 30

5 Calcul lagrangien de la configuration aéronautique TLC (Jaegle [2009]). 31

6 Champ de Y_{OH} et de dissipation scalaire obtenue avec deux formulations d'ADF-PCM pour la flamme de Cabra. Les lignes bleues indiquent la hauteur d'allumage expérimentale (Michel et al. [2009b]). 34

7 Calcul eulérien de l'injection de type Diesel sur un cas de bombe pressurisée (gauche , Martinez et al. [2009]) et sur un cycle complet dans un cylindre (droite, Martinez [2010]). 34

1.1 Classification et domaine de validité des méthodes de résolution d'une phase dispersée selon Balachandar [2009] en fonction du nombre de Stokes et du ratio taille des particules sur plus petite échelle résolue. 38

1.2 Écoulement dans un réseau fixe de particules : trajectoires du gaz (gauche) et profils de vitesse (droite) (www.cerfacs.fr, Massol [2003]). 38

1.3 Principe de la méthode de décomposition multipolaire de l'écoulement autour d'une particule (Abbas [2008]). 39

1.4 Méthodes de résolution de l'équation de Williams-Boltzmann. 42

1.5 Décomposition de la vitesse d'un nuage de particules en vitesse corrélée et vitesse décorrélée. 43

1.6 Fonction densité de probabilité réelle (ligne pointillée) et représentation sectionnelle (ligne continue). 45

2.1 Répresentation de l'effort de modélisation en RANS (a) et en LES (b) sur un spectre d'énergie en fonction de la fréquence. 59

2.2 Spectre d'énergie de la phase gazeuse pour une THI avec phase dispersée à différents nombre de Stokes (Ferrante and Elghobashi [2003]) : sans particules (A), avec particules à nombre de Stokes 0.1 (B), 0.25 (C), 1.0 (D), et 5.0 (E). 63

2.3 Principe de l'effort contra-rotatif exercé par une phase dispersée à fort nombre de Stokes sur une structure tourbillonnaire. 63

2.4 Cas test de Masi et al. [2010]. 65

2.5 Profil exact (ligne continue) et profil modélisé (triangles) de dissipation moyenne à $St \approx 1$ (Masi et al. [2010]). 66

2.6 Fdp exacte (ligne discontinue) et fdp modélisé (ligne continue) de dissipation locale à $St \approx 1$ (Masi et al. [2010]). 66

3.1 Principe de la méthode cell-vertex, en deux étapes : assemblage et distribution. D'après Moureau [2004] 74

3.2 erreur de diffusion (gauche, module du facteur d'amplification z) et de dispersion (droite, argument du facteur d'amplification sur argument du facteur d'amplification exact) en fonction de la fréquence pour les différents schémas de AVBP (Colin and Rudgyard [2000]). 76

3.3 Principe des schémas à résidus distribués décentrés : triangle à une cible (un nœud aval, droite) et triangle à deux cibles (deux nœuds aval, gauche). 77

3.4 Principe de la distribution des résidus pour les schémas Narrow et PSI pour un triangle à deux cibles. 78

3.5 Valeur du senseur de viscosité artificielle en fonction des gradients Δ_1 et Δ_2 avec une valeur de référence de 20, pour le senseur JR (gauche) et le senseur Colin (droite). . . 83

3.6 Valeur du senseur de viscosité artificielle en fonction de la différence entre les deux gradients $\Delta_2 - \Delta_1$ avec une valeur de référence de 1 (gauche), 10 (centre)et 100 (droite), pour les senseurs JR (cercles), Colin (triangles vers la droite), CM5 (triangles vers le haut) et CM10 (carrés). 84

3.7 Comparaison des profils de densité de nombre de gouttes entre la solution exacte (ligne continue) et la solution après un cycle pour PSI (ligne pointillée), TTGC+JR (ligne point-tiret), et TTGC+CM5(ligne discontinue), pour 25 (a), 50 (b), 100 (c), 200 (d), 400 (e) et 1000 (f) cellules, pour une solution initiale gaussienne 86

3.8 Erreur relative en norme L2 de la convection d'une gaussienne en fonction du nombre de cellules, pour PSI (carrés), TTGC+JR (cercles) et TTGC+CM5 (triangles). 87

3.9 Erreur relative locale de la convection d'une gaussienne pour TTGC+JR (ligne continue) et TTGC+CM5 (ligne discontinue), pour 25 (a), 50 (b), 100 (c), 200 (d), 400 (e) et 1000 (f) cellules. 88

3.10 Comparaison des profils de densité de nombre de gouttes entre la solution exacte (ligne continue) et la solution après un cycle pour PSI (ligne pointillée), TTGC+JR (ligne point-tiret), et TTGC+CM5 (ligne discontinue), pour 25 (a), 50 (b), 100 (c), 200 (d), 400 (e) et 1000 (f) cellules, pour une solution initiale en créneau. 89

3.11 Erreur relative en norme L2 de la convection d'un créneau en fonction du nombre de cellules, pour PSI(carrés), TTGC+JR(cercles) et TTGC+CM5(triangles). 90

3.12 Erreur relative locale de la convection d'un créneau pour TTGC+JR (ligne continue) et TTGC+CM5 (ligne discontinue), pour 25 (a), 50 (b), 100 (c), 200 (d), 400 (e) et 1000 (f) cellules. 91

4.1 Spectre de Passot-Pouquet : comparaison entre spectre théorique (ligne continue), spectre généré à $t = 0$ (ligne pointillée), et spectre à $t = t_0$. 94

4.2 Décroissance de l'énergie turbulente de la THI : solution analytique obtenue d'après le modèle k-ε (ligne pointillée), calcul NTMIX (cercles pleins), calcul AVBP (carrés vides). 95

4.3 Turbulence Homogène Isotrope (plan de coupe médian selon z) : fraction volumique de liquide (gauche) et vorticité du gaz (droite). 96

4.4 Evolution de l'énergie moyenne de la phase dispersée : énergie totale obtenue par DPS (cercles) et par FEM (ligne continue) ; énergie corrélée obtenue par DPS (carrés) et FEM (ligne discontinue) ; énergie décorrélée obtenue par DPS (triangles) et FEM (ligne pointillée). 97

4.5 Evolution de l'énergie décorrélée : DPS (triangles) et FEM (ligne pointillée). 97

4.6 Evolution de la fonction de dispersion : DPS (cercles) et FEM (carrés). 97

4.7 Champs de densité de nombre de gouttes (haut) et senseur de viscosité artificielle (bas) pour le senseur JR (gauche) et le senseur CM5 (droite). 98

4.8 Evolution de la fonction de dispersion en fonction du temps pour le calcul lagrangien (cercles), et les calculs eulériens avec les senseurs JR (ligne pointillée), CM5 (ligne discontinue) et CM10 (ligne continue). 99

4.9 Évolution de $\zeta.\varepsilon^{(2)}$ en fonction du temps pour les senseurs JR(carrés), CM5 (triangles) et CM10 (cercles). 100

4.10 Evolution de $\zeta.\varepsilon^{(2)}$ en fonction de la fraction volumique pour les senseurs JR (carrés) et CM10 (cercles). 100

5.1 Schéma du cas test du jet en écoulement transverse. 104

5.2 Fdp du jet en écoulement transverse : approche monodisperse (ligne continue, cette courbe n'est pas normalisée) et approche multi-fluide (ligne tiretée). 104

5.3 Jet en écoulement transverse 2D : champs de densité de nombre de gouttes obtenus avec l'approche multi-fluide (10 sections, gauche) et l'approche monodisperse (droite). 105

5.4 Comparaison du diamètre moyen d10 en fonction de la coordonnée verticale sur la condition limite de sortie , pour un calcul lagrangien (ligne continue), un calcul eulérien à 5 sections (cercles), et un calcul eulérien à 10 sections (carrés). 106

5.5 Condition initiale de densité de nombre (gauche) et de masse (droite) : gaussienne (triangles), double pic (triangles vers la droite) et créneau (carrés). 108

5.6 Reconstruction initiale de la condition gaussienne pour 5 (en haut à gauche), 10 (en haut à droite), 20 (en bas à gauche) et 100 (en bas à droite) sections : solution initiale (ligne continue), modèle d'ordre 1 (ligne point-tiretée) et modèle d'ordre 2 (ligne tiretée). 109

5.7 Erreur de reconstruction en fonction du nombre de sections pour la condition initiale gaussienne avec le modèle d'ordre 1 (carrés) et le modèle d'ordre 2 (cercles). 109

5.8 Evolution de la masse totale rapportée à la masse initiale pour la solution initiale gaussienne avec 5 (en haut à gauche), 10 (en haut à droite), 20 (en bas à gauche) et 100 (en bas à droite) sections : solution exacte (ligne continue), modèle d'ordre 1 (ligne point-tiretée) et modèle d'ordre 2 (ligne tiretée). 110

5.9 Evolution du SMR rapporté au SMR initial pour la solution initiale gaussienne avec 5 (en haut à gauche), 10 (en haut à droite), 20 (en bas à gauche) et 100 (en bas à droite) sections : solution exacte (ligne continue), modèle d'ordre 1 (ligne point-tiretée) et modèle d'ordre 2 (ligne tiretée). 111

5.10 Erreur sur la masse totale en fonction du nombre de sections pour la condition initiale gaussienne avec le modèle d'ordre 1 (carrés) et le modèle d'ordre 2 (cercles). 111

5.11 Reconstruction initiale de la condition en créneau pour 5 (en haut à gauche), 10 (en haut à droite), 20 (en bas à gauche) et 100 (en bas à droite) sections : solution initiale (ligne continue), modèle d'ordre 1 (ligne point-tiretée) et modèle d'ordre 2 (ligne tiretée). 112

5.12 Evolution de la masse totale rapportée à la masse initiale pour la solution en créneau avec 5 (en haut à gauche), 10 (en haut à droite), 20 (en bas à gauche) et 100 (en bas à droite) sections : solution exacte (ligne continue), modèle d'ordre 1 (ligne point-tiretée) et modèle d'ordre 2 (ligne tiretée). 113

5.13 Evolution du SMR rapporté au SMR initial pour la solution en créneau avec 5 (en haut à gauche), 10 (en haut à droite), 20 (en bas à gauche) et 100 (en bas à droite) sections : solution exacte (ligne continue), modèle d'ordre 1 (ligne point-tiretée) et modèle d'ordre 2 (ligne tiretée). 114

5.14 Erreur sur la masse totale en fonction du nombre de sections pour la condition initiale en créneau avec le modèle d'ordre 1 (carrés) et le modèle d'ordre 2 (cercles). 114

5.15 Reconstruction initiale de la condition bimodale pour 5 (en haut à gauche), 10 (en haut à droite), 20 (en bas à gauche) et 100 (en bas à droite) sections : solution initiale (ligne continue), modèle d'ordre 1 (ligne point-tiretée) et modèle d'ordre 2 (ligne tiretée). . . 115

5.16 Erreur de reconstruction en fonction du nombre de sections pour la condition initiale bi-modale avec le modèle d'ordre 1 (carrés) et le modèle d'ordre 2 (cercles). 116

5.17 Evolution de la masse totale rapportée à la masse initiale pour la solution bimodale avec 5 (en haut à gauche), 10 (en haut à droite), 20 (en bas à gauche) et 100 (en bas à droite) sections : solution exacte (ligne continue), modèle d'ordre 1 (ligne point-tiretée) et modèle d'ordre 2 (ligne tiretée). 116

5.18 Evolution du SMR rapporté au SMR initial pour la solution bimodale avec 5 (en haut à gauche), 10 (en haut à droite), 20 (en bas à gauche) et 100 (en bas à droite) sections : solution exacte (ligne continue), modèle d'ordre 1 (ligne point-tiretée) et modèle d'ordre 2 (ligne tiretée). 117

5.19 Erreur sur la masse totale en fonction du nombre de sections pour la condition initiale bimodale avec le modèle d'ordre 1 (carrés) et le modèle d'ordre 2 (cercles). 118

6.1 Vues du montage expérimental sur le banc Mercato. Crédit photo : Garcia-Rosa [2008]. 125

6.2 Croquis des plans des traversées optiques réalisées. 126

6.3 Configuration de calcul de la chambre de combustion Mercato. 127

6.4 Coupe longitudinale du maillage. 127

6.5 Coupe longitudinale du maillage avec les positions des plans de mesure. 128

6.6 Schéma d'un atomiseur de type simplex. 130

6.7 Schématisation des étapes du modèle FIMUR : caractérisation du liquide en sortie de l'injecteur (pour une simulation lagrangienne) et sur un plan en aval de l'injecteur (pour une simulation eulérienne). 131

6.8 Fdp en fonction du diamètre : expérience à 6mm du fond de chambre (histogramme) et condition limite d'injection pour le calcul FEMM 10 sections (ligne continue). . . . 132

7.1 Coupe longitudinale de vitesse axiale moyenne de la phase gazeuse. Les isocontours à vitesse axiale nulle représentent la position des zones des recirculation. 134

7.2 Coupe longitudinale du rapport entre la viscosité turbulente et la viscosité laminaire pour une solution instantanée de la phase gazeuse. 135

7.3 Coupe longitudinale d'énergie cinétique moyenne résolue de la phase gazeuse. 135

7.4 Coupe longitudinale d'énergie cinétique turbulente résolue de la phase gazeuse. 136

7.5 Vitesse moyenne axiale de la phase gazeuse à 6, 26, 56, 86 et 116 mm du fond de chambre : expérience (carrés) et simulation (ligne continue). 137

7.6 Vitesse moyenne radiale de la phase gazeuse à 6, 26, 56, 86 et 116 mm du fond de chambre : expérience (carrés) et simulation (ligne continue). 137

7.7 Vitesse moyenne orthoradiale de la phase gazeuse à 6, 26, 56, 86 et 116 mm du fond de chambre : expérience (carrés) et simulation (ligne continue). 138

7.8 RMS de vitesse axiale de la phase gazeuse à 6, 26, 56, 86 et 116 mm du fond de chambre : expérience (carrés) et simulation (ligne continue). 138

7.9 RMS de vitesse radiale de la phase gazeuse à 6, 26, 56, 86 et 116 mm du fond de chambre : expérience (carrés) et simulation (ligne continue). 139

7.10 RMS de vitesse orthoradiale de la phase gazeuse à 6, 26, 56, 86 et 116 mm du fond de chambre : expérience (carrés) et simulation (ligne continue). 139

8.1 Coupe longitudinale des champs moyens de la phase liquide totale : fraction volumique (a), densité en nombre de gouttes (b), température (c) et D10 (d). 146

8.2 Coupe longitudinale des champs moyens de la phase liquide totale : vitesse axiale (a), énergie cinétique (b), énergie cinétique turbulente (c), et énergie décorrélée (d). 147

8.3 Coupe longitudinale de champs moyens pour les sections $15-30\mu m$ (a), $60-75\mu m$ (b) et $135-150\mu m$ (c) : densité en nombre de gouttes (gauche) et fraction volumique (droite). 148

8.4 Coupe longitudinale de champs moyens pour les sections $15-30\mu m$ (a), $60-75\mu m$ (b) et $135-150\mu m$ (c) : énergie cinétique (gauche), énergie turbulente (centre) et énergie décorrélée (droite). 149

8.5 Coupe longitudinale de champs moyens pour les sections 15-30 μm(a), 60-75 μm(b) et 135-150 μm(c) : ratio de la viscosité RUM sur la viscosité turbulente (gauche) et ratio de la pression RUM sur la pression de sous-maille (droite). 150

8.6 Coupe longitudinale instantanée de fraction volumique de la section $0-15\mu m$ (gauche) et la section $135-150\mu m$ (droite) classe, à la sortie de l'injecteur, avec la visualisation du maillage. 151

8.7 Coupe longitudinale de fraction volumique totale moyenne dans la zone proche paroi, et pseudo-lignes de courant décrivant le mouvement axial et radial de la phase liquide totale. . . . 151
8.8 Coupe longitudinale de fraction volumique totale moyenne : comparaison entre FEMM (a), FEM (b) et EL (c). . . . 155
8.9 Profils de vitesse axiale du liquide à 6, 26 et 56 mm du fond de chambre : expérience (carrés), FEMM (ligne continue), FEM (ligne tiretée) et EL (ligne point-tiretée). . . . 156
8.10 Profils de vitesse radiale du liquide à 6, 26 et 56 mm du fond de chambre : expérience (carrés), FEMM (ligne continue), FEM (ligne tiretée) et EL (ligne point-tiretée). . . . 156
8.11 Profils de vitesse orthoradiale du liquide à 6, 26 et 56 mm du fond de chambre : expérience (carrés), FEMM (ligne continue), FEM (ligne tiretée) et EL (ligne point-tiretée). . . . 157
8.12 Profils de RMS de vitesse axiale du liquide à 6, 26 et 56 mm du fond de chambre : expérience (carrés), FEMM (ligne continue), FEM (ligne tiretée) et EL (ligne point-tiretée). . . . 157
8.13 Profils de RMS de vitesse radiale du liquide à 6, 26 et 56 mm du fond de chambre : expérience (carrés), FEMM (ligne continue), FEM (ligne tiretée) et EL (ligne point-tiretée). . . . 158
8.14 Profils de RMS de vitesse orthoradiale du liquide à 6, 26 et 56 mm du fond de chambre : expérience (carrés), FEMM (ligne continue), FEM (ligne tiretée) et EL (ligne point-tiretée). . . . 158
8.15 Profils de RMS de vitesse axiale du liquide à 6, 26 et 56 mm du fond de chambre pour le FEMM : RUM+RMS résolus (ligne continue), RMS résolus (ligne tiretée), et RUM (ligne pointillée). . . . 159
8.16 Profils de RMS de vitesse radiale du liquide à 6, 26 et 56 mm du fond de chambre pour le FEMM : RUM+RMS résolus (ligne continue), RMS résolus (ligne tiretée), et RUM (ligne pointillée). . . . 159
8.17 Profils de RMS de vitesse orthoradiale du liquide à 6, 26 et 56 mm du fond de chambre pour le FEMM : RUM+RMS résolus (ligne continue), RMS résolus (ligne tiretée), et RUM (ligne pointillée). . . . 160
8.18 Coupe longitudinale instantanée du paramètre s* du tenseur de cisaillement de la phase liquide totale. . . . 160
8.19 Position des points de mesure des statistiques par taille. . . . 163
8.20 Fonctions densité de probabilité à 6, 26 et 56 mm du fond de chambre : expérience (histogramme), FEMM (ligne continue) et EL (ligne discontinue). . . . 164

8.21 Vitesse axiale moyenne en fonction du diamètre à 6, 26 et 56 mm du fond de chambre : expérience (histogramme), FEMM (ligne continue) et EL (ligne discontinue). 165

8.22 Vitesse radiale moyenne en fonction du diamètre à 6, 26 et 56 mm du fond de chambre : expérience (histogramme), FEMM (ligne continue) et EL (ligne discontinue). 166

8.23 Vitesse orthoradiale moyenne en fonction du diamètre à 6, 26 et 56 mm du fond de chambre : expérience (histogramme), FEMM (ligne continue) et EL (ligne discontinue). 167

8.24 Profils de diamètre moyen arithmétique à 6, 26 et 56 mm du fond de chambre : FEMM (ligne continue), FEM (ligne tiretée) et EL (ligne point-tiretée). 168

8.25 Profils de flux de fraction volumique à 6, 26 et 56 mm du fond de chambre : FEMM (ligne continue), FEM (ligne tiretée) et EL (ligne point-tiretée). 170

8.26 Coupe longitudinale de fraction massique de kérosène instantanée : comparaison entre FEMM (a), FEM (b) et EL (c). 171

A.1 Efficacité réduite en fonction du nombre de classes pour un ncgroup de 5 (cercles), 40 (carrés) et 90 (triangles), obtenue sur 16 processeurs AMD Opteron Barcelona 8356 à 2.3 ghz. 190

A.2 Efficacité réduite en fonction du ncgroup pour 0 (cercles), 1 (carrés), 5 (triangles vers le haut) et 10 classes (triangles vers la droite), obtenue sur 16 processeurs AMD Opteron Barcelona 8356 à 2.3 ghz. 191

A.3 Efficacité réduite en fonction du nombre de classes pour un ncgroup de 5 (cercles), 40 (carrés) et 90 (triangles), obtenue sur 4 processeurs Intel Xeon W3520 cadencés à 2.66ghz. 191

A.4 Efficacité réduite en fonction du ncgroup pour 0 (cercles), 1 (carrés), 5 (triangles vers le haut) et 10 classes (triangles vers la droite), obtenue sur 4 processeurs Intel Xeon W3520 cadencés à 2.66ghz. 192

A.5 Mémoire vive utilisée par AVBP en fonction du nombre de classes. 192

B.1 Ecoulement autour d'une sphère en fonction du nombre de Stokes. 193

B.2 Corrélation empirique du coefficient de trainée de Schiller and Nauman [1935], en comparaison aux résultats expérimentaux de Roos and Wilmarth [1971]. 195

B.3 Niveau de couplage entre la phase dispersée et la phase gazeuse en fonction de la fraction volumique de liquide selon Elgobashi and Truesdell [1993]. 196

B.4 Goutte isolée à la température T_ζ s'évaporant dans un écoulement de gaz à la température T_∞ et avec une fraction massique de carburant $Y_{F,\infty}$. 196

Liste des tableaux

4.1 Constantes d'adimensionnalisation. 94

4.2 Paramètres d'initialisation du spectre de Passot-Pouquet : vitesse turbulente u', longueur d'onde la plus énergétique $l_e = 2\pi/k_e$, viscosité dynamique μ_f, et masse molaire $\mathcal{M}_f$. . . 94

4.3 Paramètres de la phase gazeuse à $t = 0$ et $t = t_0$ où ε est la dissipation, Re_t le nombre de Reynolds turbulent, l_t l'échelle intégrale, η l'échelle de Kolmogorov, τ_L le temps de l'échelle intégrale et τ_K le temps de Kolmogorov. 95

4.4 Paramètres de la phase liquide injectée en THI à $t = t_0$. 95

5.1 Conditions aux limites du jet en écoulement transverse. 105

5.2 Paramètres numériques du jet en écoulement transverse. 105

6.1 Conditions aux limites pour la phase gazeuse. 129

6.2 Conditions aux limites pour la phase liquide. 129

6.3 Définition du *surrogate* du kérosene par Luche [2003]. 130

6.4 Propriétés du surrogate KERO_LUCHE sous forme liquide : T_b est la température d'ébullition, ρ_l la densité, $C_{p,l}$ la capacité calorifique, et L_{vap} la chaleur latente de vaporisation du liquide. 130

6.5 Paramètres décrivant l'atomiseur liquide. 131

8.1 Position des points de mesure des statistiques par taille. 163

8.2 Résumé des comparaisons faites entre le FEM, l'EL et le FEMM par rapport à l'expérience : - - accord mauvais - accord passable + accord correct + + accord satisfaisant (les cases grisée signalent la méthode qui donne les meilleurs résultats) 172

Nomenclature

Abréviations

CFL Condition de stabilité de type Courant-Friedrichs-Levy

CM Colin-Martinez

DNS Direct Numerical Simulation

DPS Discrete Particle Simulation

EL Euler-Lagrange

EWB Equation de Williams-Boltzmann

fdp Fonction Densité de Probabilité

FEM Formalisme eulérien mésoscopique

FEMM Formalisme eulérien mésoscopique multifluide

FIMUR Fuel Injection Method by Upstream Reconstruction

GIEC Groupement d'experts intergouvernemental sur l'évolution du climat

JR Jameson-Riber

LES Large Eddy Simulation

LW Lax-Wendroff

PDF Probability Density Function

PSI Positive Streamwise Invariant

RANS Reynolds Averaged Navier-Stokes

RMS Root Mean Square

RUE Random Uncorrelated Energy

RUM Random Uncorrelated Motion

RUV Random Uncorrelated Velocity

THI Turbulence Homogène Isotrope

TTGC Two-step Taylor-Galerkin Colin

TVD Total Variation Diminishing

VF Volumes finis

WENO Weighted Essentially Non-Oscillatory

Exposants

(p) section p

$*$ Partie déviatrice

tot phase totale

Lettres grecques

α_l Fraction volumique de liquide

$\delta\delta\Theta_l$ Energie du mouvement décorrélé

$\delta R_{p,ij}$ Tenseur de second ordre des vitesses décorrélées

$\delta S_{p,ijk}$ Tenseur de troisième ordre des vitesses décorrélées

δt pas de temps

$\delta u_{p,i}$ Vitesse décorrélée associée à la particule p

Δ Evaluation du gradient

ε Dissipation turbulente

η Echelle de Kolmogorov

μ Viscosité dynamique

ν Viscosité cinématique

Φ_c Flux conductif de la phase liquide

ρ Masse volumique

τ Temps caractéristique

τ_p Temps de relaxation de la particule

ζ Senseur de viscosité artificielle

Lettres latines

c	Vitesse du son
$c_{p,j}$	Vitesse d'une particule dans l'espace des phases
$C_{p,l}$	Capacité calorifique du liquide
d	diamètre
E	Efficacité réduite
E_{kin}	Energie cinétique moyenne
E_{turb}	Energie cinétique turbulente moyenne
E_T	Flux de changement de température d'une particule dans l'espace des phases
F_i	Forces extérieures
f_p	Fonction densité de probabilité
g_{pp}	Concentration préférentielle
H_l	Enthalpie de la phase liquide
k	Energie turbulente
Kn	Nombre de Knudsen
m_l	Masse de gouttes
m_p	Masse d'une particule
M_S^k	Moment d'ordre k de la variable S
n_l	Nombre de gouttes
P	Pression
Q_i	Flux des contraintes de sous-mailles
R_S	Flux de changement de taille d'une particule dans l'espace des phases
Re	Nombre de Reynolds
S	Surface d'une particule dans l'espace des phases
S_m	Surface moyenne d'une section
St	Nombre de Stokes
T	Température d'une particule dans l'espace des phases
T_{ij}	Tenseur des contraintes de sous-mailles
$u_{l,i}$	Vitesse de la phase liquide

$u_{p,i}$ Vitesse d'une particule

w_p Poids de la quadrature des moments

x_j Position d'une particule dans l'espace des phases

$x_{p,i}$ Position d'une particule p

Opérateurs

$< . >$ Moyenne massique

$\bar{.}$ Moyenne de Reynolds

$\breve{.}$ Quantité mésoscopique

$\hat{.}$ Moyenne de Favre

$.$ Moyenne statistique

Indices

g Phase porteuse ou phase gazeuse

k Phase k

l Phase liquide ou dispersée

RUM Dû au mouvement décorrélé

Introduction

Contexte industriel

La raréfaction des énergies fossiles et la nécessité de réduction des émissions de gaz à effet de serre ont révélé de nouveaux enjeux à la fois économiques et techniques. Les secteurs du transport étant parmi les principaux émetteurs de gaz à effet de serre (Fig. 1, GIEC [2007]), ils sont en première ligne pour faire face à ces défis majeurs.

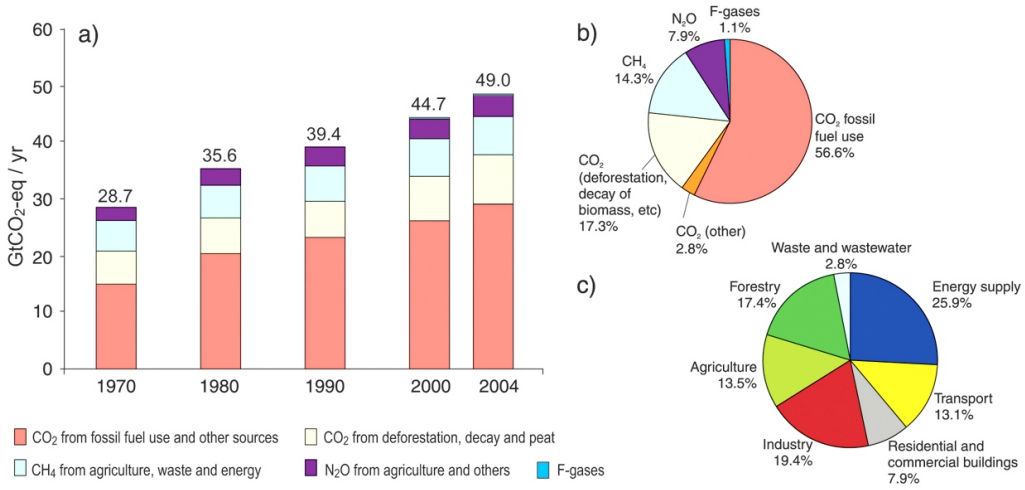


FIGURE 1 – Répartition des émissions de gaz à effet de serre en fonction des activités humaines (GIEC [2007]).

Dans ce contexte, les industriels recherchent des solutions rentables et innovantes, aussi bien à court, moyen et long termes. Deux voies s'offrent à nous :

- L'utilisation d'énergies alternatives : hydrogène, biomasse, solaire et électrique sont les solutions principales envisagées à ce jour,
- La réduction de la consommation : l'objectif est l'optimisation des technologies existantes pour réduire la consommation.

Simulation numérique

Dans ce contexte très dynamique, où plusieurs alternatives sont disponibles, et où personne ne peut dire quelle sera la meilleure solution dans les prochaines décennies, plusieurs méthodes de recherche doivent être utilisées. La première est la recherche expérimentale, permettant notamment la validation des modèles physiques et numériques. Les solutions sont mises en pratique, d'abord sur des montages simplifiés expérimentaux puis progressivement vers l'application finale (du simple moteur monocylindre à la voiture complète ou dans le domaine aéronautique du simple brûleur à l'hélicoptère complet). Cependant, le coût des montages et la difficile accessibilité de certaines grandeurs physiques dans des zones capitales non directement mesurables (proche injecteur par exemple) conduisent à l'utilisation complémentaire de la simulation numérique.

En effet, la simulation numérique permet de s'affranchir des limites de l'expérience. En modélisant tous les phénomènes physiques, il est possible d'avoir accès à toutes les grandeurs physiques de l'écoulement, avec une précision liée à la qualité de la modélisation. Les approches de simulation peuvent être hiérarchisées en coût/précision.

Parmi les différentes formes de simulation numérique, l'approche la moins coûteuse est la simulation 0D, permettant d'envisager la modélisation d'un véhicule complet. Chaque élément d'un système est pris en compte par un modèle physique. En reliant tous les modèles, on peut simuler le système complet (Fig. 2). Cette approche est très utilisée à l'IFP énergies nouvelles pour la simulation moteur dite "temps réel" (Mauviot [2006], Dulbecco [2010]), de façon conjointe au contrôle moteur, ce genre de simulation étant réalisable à l'échelle du temps physique (un phénomène qui se passe en 10ms dans la réalité pourra être modélisé dans un temps de même échelle). Cependant, cette réduction de la physique est dépendante du cas test étudié, et cette approche, même si elle est très efficace, nécessite de pouvoir ajuster le comportement des modèles.

L'approche est totalement différente en simulation 3D, où on résout les phénomènes dans l'espace physique. Il est possible de résoudre complètement l'écoulement, mais cette approche dite DNS (Direct Numerical Simulation) est inaccessible pour des calculs de type industriel avec une large gamme d'échelles et des géométries très complexes. L'approche la plus utilisée à ce jour dans l'industrie est l'approche RANS (Reynolds Averaged Navier Stokes), qui calcule une moyenne statistique de toutes les réalisations de l'écoulement, et avec laquelle il est délicat de représenter les effets instationnaires dûs à la turbulence.

Une autre approche a émergé ces dernières années : la simulation aux grandes échelles (SGE ou LES en anglais), qui résout l'écoulement dans le temps, sans moyenne statistique, de manière à capturer une partie des phénomènes instationnaires. L'idée est de ne simuler que les grandes échelles de l'écoulement, et de modéliser les petites échelles pour ne pas avoir à les résoudre et donc les mailler. C'est ce type d'approche à laquelle nous nous intéressons ici.

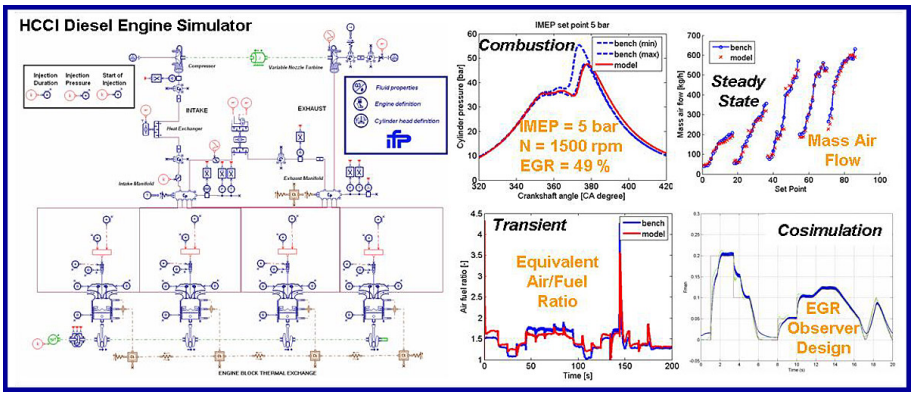


FIGURE 2 – Exemple de simulation système d'un moteur Diesel HCCI (www.ifp.fr).

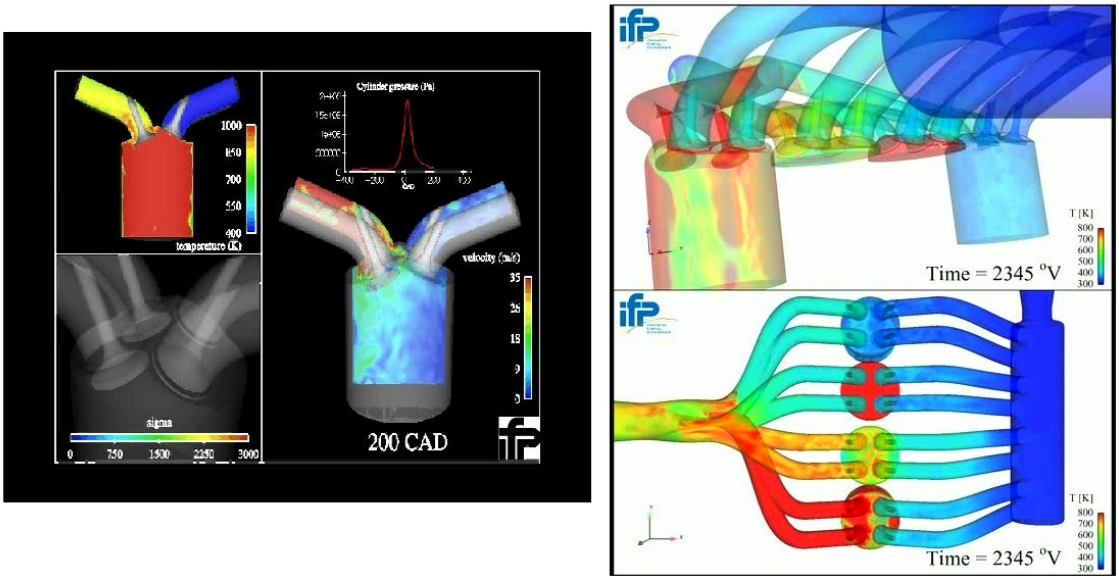


FIGURE 3 – Simulation LES multicycles du moteur XU10 de PSA (gauche, Vermorel et al. [2009]) et d'un moteur multicylindres à allumage commandé (droite, Laget et al. [2011]).

Physique de l'injection

Que ce soit dans les moteurs aéronautiques ou automobiles, le carburant est initialement stocké sous forme liquide. Il faut donc faire passer ce carburant de l'état liquide à l'état gazeux avant de le brûler. Pour cela, des technologies d'injection spécifiques sont utilisées pour pouvoir évaporer efficacement. La physique de l'injection est très complexe (Baumgarten [2006]). Elle se décompose en trois parties spécifiques :

– La première partie concerne l'écoulement dans l'injecteur. C'est ici que se prépare la désintégration du jet. Les phénomènes de cavitation et de turbulence y sont primordiaux, fortement liés à la géométrie et aux conditions physiques de l'injecteur.
– La deuxième zone se situe juste en sortie de l'injecteur. C'est ici que la fragmentation du jet liquide commence par les phénomènes d'instabilités de type Kelvin-Helmholtz et Rayleigh-Taylor. La simulation de ces phénomènes fait l'objet de nombreux travaux et de nombreuses publications (Ménard et al. [2007], Desjardins et al. [2008], Gorokhovski and Hermann [2008],).
– La dernière zone se situe loin de l'injecteur, là où le liquide est en phase dispersée, c'est-à-dire composé uniquement de gouttes sphériques. Cette zone est le lieu de nombreux phénomènes physiques, comme l'atomisation secondaire, l'évaporation, la combustion, ou encore les interactions liquide-gaz. Nous nous intéressons ici à la simulation de cette zone.

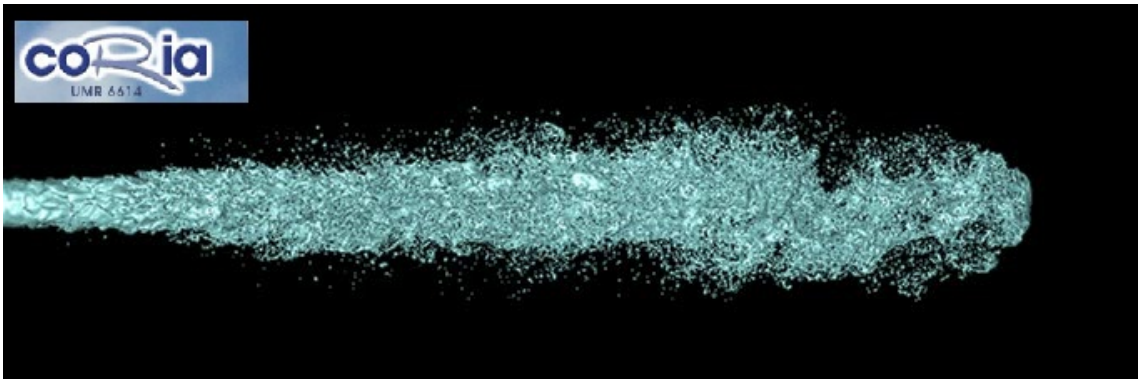


FIGURE 4 – Simulation VOF/Level set/Ghost Fluid de l'atomisation d'un jet liquide de type Diesel (Ménard et al. [2007]).

Simulation d'une phase dispersée

Pour simuler une phase dispersée, deux classes d'approches sont disponibles : la formulation lagrangienne et la formulation eulérienne. La formulation lagrangienne calcule la trajectoire de chaque goutte de l'écoulement par des équations lagrangiennes (évolution de la position et de la vitesse de chaque particule). Ce type d'approche est la plus utilisée aussi bien dans la recherche que dans l'industrie. Cependant des limitations contraignent l'utilisation d'une telle approche :

– Le temps de calcul : pour un nombre de gouttes important, il devient rédhibitoire. La prise en compte des interactions gouttes-gouttes augmente encore plus ce temps de calcul,
– Les échanges liquide-gaz : le phase liquide est sous une représentation discrète alors que la phase gazeuse est sous une représentation continue, ce qui impose d'interpoler les quantités entre ces deux formulations, et peut introduire une erreur,
– La parallélisation : quand la répartition de la phase dispersée est très hétérogène, il devient très

compliqué de la paralléliser efficacement, ce qui est très important dans le calcul haute performance.

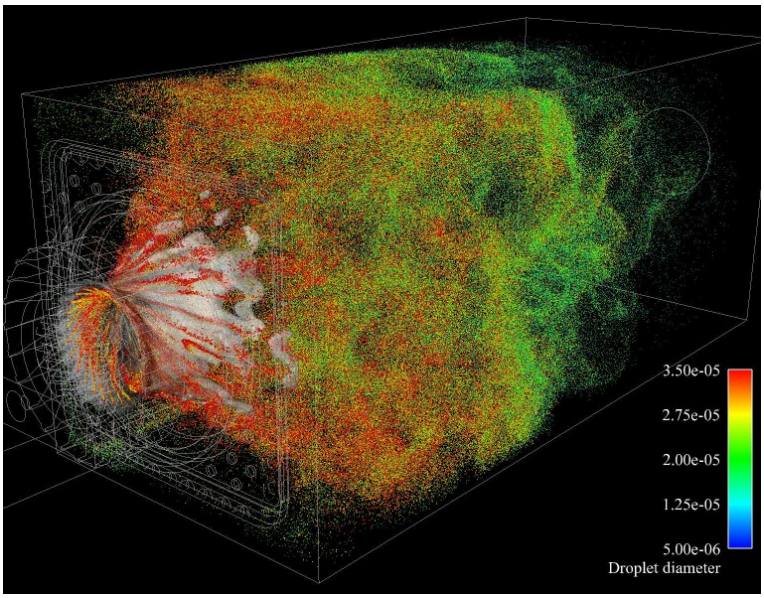


FIGURE 5 – Calcul lagrangien de la configuration aéronautique TLC (Jaegle [2009]).

Les limitations d'une formulation lagrangienne ont conduit le développement des approches eulériennes, pour lesquelles on calcule les moments des statistiques de la phase dispersée globale. Ce type d'approche est très utilisée pour la simulation des lits fluidisés notamment (Boelle [1999], Gourdel [1999]), mais reste très jeune pour l'application automobile ou aéronautique. Il répond aux restrictions de l'approche lagrangienne :

- Le temps de calcul ne dépend pas du nombre de gouttes, mais seulement du maillage et du nombre d'équations du modèle eulérien,
- Les phases liquide et gazeuse sont dans une même formulation eulérienne. Il n'y a donc pas d'interpolation pour les échanges liquide-gaz,
- La parallélisation de la phase liquide est identique à celle de la phase gazeuse.

Les modèles eulériens statistiques se basent sur l'équation de Williams-Boltzmann, l'enjeu résidant dans les hypothèses et les méthodes d'intégration de cette équation. L'approche la plus simple est de type bi-fluide, pour laquelle on transporte un jeu d'équations pour le gaz, et un jeu d'équations similaire pour le liquide (équations eulériennes pour le gaz et le liquide). L'extension de ce type d'approche à des écoulements turbulents a été proposée dans Simonin [1996], Simonin and Lavieville [2002], Février et al. [2005] par une décomposition statistique de la vitesse des particules en composantes corrélée et décorrélée.

D'autres extensions du modèle bi-fluide ont été proposées. La prise en compte de la polydispersion est plus délicate qu'en lagrangien, et l'approche consiste à intégrer les équations en supposant une fonc-

tion densité de probabilité (fdp) en taille de goutte (méthodes à fdp présumées). Cette approche a été notamment étudiée par Mossa [2005], où elle a montré d'importantes limites, notamment en terme de représentation du phénomène d'évaporation. Une autre possibilité consiste à diviser l'espace des tailles en intervalles appelés sections (Greenberg et al. [1993]). Laurent and Massot [2001] ont ainsi développé l'approche multi-fluide qui permet de prendre en compte les effets de la polydispersion sur l'évaporation et la traînée. Initialement de premier ordre, la précision de cette méthode a été par la suite élevée au second ordre (Dufour [2005], Laurent [2006]). Son principal défaut est la multiplication du système d'équations par autant de classes qui sont nécessaires pour représenter l'écoulement.

Des méthodes de quadrature de moments ont aussi été proposées (Marchisio et al. [2003]). Une quadrature de Gauss de la fdp (représentation en plusieurs Dirac) permet de bien reproduire les phénomènes d'évolution de la taille des gouttes (évaporation, fragmentation, coalescence). Ce passage par la quadrature étant coûteux, une autre approche proposée par Fox et al. [2008] transporte directement les Diracs, plutôt que de transporter les moments. Plus récemment, Kah et al. [2009] et Massot et al. [2010] ont proposé une méthode d'ordre élevé, qui se base sur une reproduction de la fdp par maximisation d'entropie, permettant de reconstruire la fdp la plus "lisse" possible en fonction des moments transportés.

Objectifs de thèse et organisation du manuscrit

L'objectif de cette thèse s'inscrit dans le développement de la LES moteur dans le code AVBP . Plusieurs travaux de thèses précédentes ont posé de nombreuses bases de développement, sur les sujets d'intérêt :

- Méthodes numériques : les développements spécifiques de Moureau [2004], notamment dans la gestion des maillages mobiles sont indispensables à la simulation d'une chambre de combustion moteur (Moureau et al. [2004b], Moureau et al. [2005]).
- Combustion : les travaux de Richard [2005] se sont intéressés à la combustion prémélangée en LES (modèle ECFM-LES, Richard et al. [2007]). Galpin [2007] s'est attaché au phénomène d'auto-inflammation et aux polluants par des méthodes de tabulations (modèle PCM-FPI, Galpin et al. [2008]) . Michel [2008a] s'est quant à lui concentré sur la prise en compte de la combustion non-prémélangée, concrétisé par le modèle ADF-PCM (Michel et al. [2008b], Michel et al. [2009a], Michel et al. [2009b]). La dernière thèse en combustion de Lecocq [2010a] concerne le couplage entre les méthodes PCM-FPI et ECFM-LES, pour prendre en compte à la fois les effets de chimie complexe par tabulation, et un transport précis de la flamme turbulente (modèles PCM-CFM, Lecocq et al. [2010b]).
- Écoulements diphasiques : les limitations intrinsèques à une formulation lagrangienne (temps de calcul pour un grand nombre de gouttes, interpolations pour les termes d'échanges) ont conduit au développement d'un solveur eulérien pour la phase liquide. Les modèles diphasiques eulériens de AVBP se basent sur des travaux initiés au CERFACS en collaboration avec l'IMFT, pour introduire

les modèles développés par Simonin [1996], Février et al. [2005] et Moreau [2006] notamment. La thèse de Kaufmann et al. [2004] a servi de point de départ pour le calcul diphasique eulérien, suivie par les thèses de Mossa [2005] et Riber [2007]. Les modèles développés ont été appliqués à des configurations industrielles entre autres dans les thèses de Lamarque [2007], Boileau [2007] et Sanjosé [2009]. Ces développements ont conduit l'IFP énergies nouvelles à lancer la thèse de Martinez [2010], dans laquelle a été abordée la question de l'adaptation des modèles initiaux à l'injection dans les moteurs à combustion interne, notamment en ce qui concerne les conditions limites d'injection (Martinez et al. [2010]) et les régimes denses. Cette thèse a aussi permis d'avancer sur les méthodes numériques pour le formalisme eulérien.

Les travaux de thèse présentés ici s'inscrivent dans la suite de la thèse de Martinez [2010]. L'objectif principal est la prise en compte de la polydispersion. Il a en effet été démontré que la polydispersion pouvait avoir une influence capitale sur la distribution spatiale du spray (Vié and Habchi [2008]). Les récents travaux de Senoner [2010] ont aussi démontré par des calculs lagrangiens l'importance de la polydispersion sur un cas d'injection de type aéronautique.

Dans ce cadre, cette thèse est décomposée en 3 parties :

- Partie 1 : Une revue des méthodes de simulation d'une phase dispersée est effectuée, allant de la résolution complète de l'écoulement autour des gouttes à la simulation eulérienne. L'accent est mis sur les méthodes permettant de prendre en compte la polydispersion. Deux formalismes sont ensuite présentés : le Formalisme Eulérien Mésoscopique (FEM) intégré dans AVBP (Février et al. [2005]), et le nouveau Formalisme Eulérien Mésoscopique Multi-fluide (FEMM), qui propose d'étendre le FEM aux écoulements polydisperses en le couplant à l'approche multi-fluide de Laurent and Massot [2001]. L'adaptation de ces deux formalismes à la LES est abordée. Une discussion sur les limites de validité de ces deux approches est proposée, en particulier sur les aspects de couplage inverse et les fermetures des modèles.
- Partie 2 : Cette partie concerne la validation du formalisme développé sur des cas simples canoniques. La première question abordée est celle des méthodes numériques utilisées pour transporter la phase dispersée. Elle est étudiée sur des cas de convection simple 1D et 2D. Une validation des fermetures dynamiques du FEM est proposée sur un cas test de Turbulence Homogène Isotrope décroissante chargée en particules. L'importance de l'impact de la polydispersion sur la traînée et de l'évaporation est évaluée sur les cas du jet en écoulement transverse (Mossa [2005]) et de l'évaporation 0D (Dufour [2005], Laurent [2006]).
- Partie 3 : L'application finale de cette thèse est la configuration MERCATO de l'ONERA (Garcia-Rosa [2008]). Dans cette configuration, l'injection est effectuée par un injecteur de type pressurisé-swirlé. Ce type d'injecteur est caractérisé par une fine nappe de liquide en cône creux animée par un mouvement de rotation (swirl). Cette injection est hautement polydisperse, comme mesuré dans Garcia-Rosa [2008]. Cette configuration a déjà été étudiée par des calculs lagrangiens (Senoner

[2010]), et eulériens monodisperses (Lamarque [2007], Roux [2009] et Sanjosé [2009]). L'objectif est ici d'effectuer un premier calcul eulérien polydisperse de cette configuration, et d'étudier les effets de la polydispersion sur les statistiques de la phase liquide et de la phase gazeuse. Une comparaison est effectuée entre l'expérience, et les résultats du FEMM, du FEM et de l'approche lagrangienne.

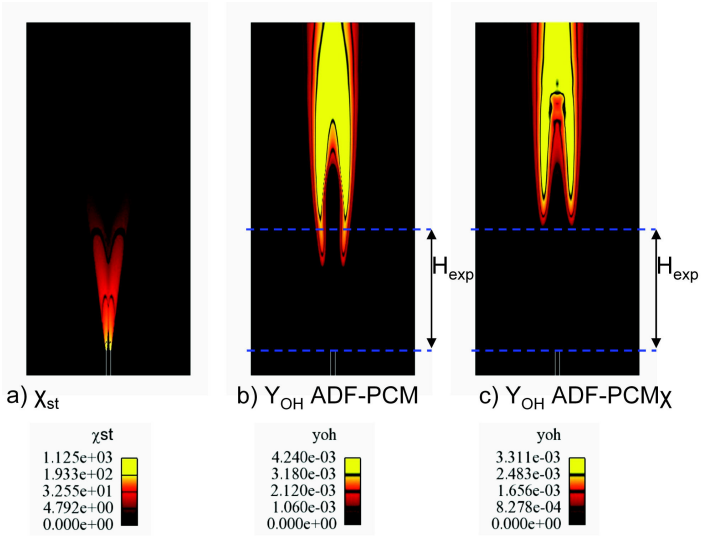


FIGURE 6 – Champ de Y_{OH} et de dissipation scalaire obtenue avec deux formulations d'ADF-PCM pour la flamme de Cabra. Les lignes bleues indiquent la hauteur d'allumage expérimentale (Michel et al. [2009b]).

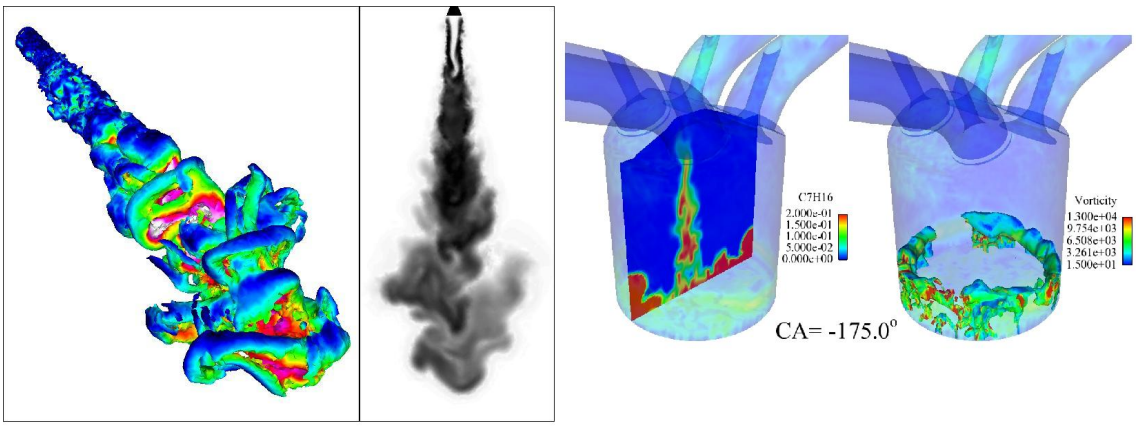


FIGURE 7 – Calcul eulérien de l'injection de type Diesel sur un cas de bombe pressurisée (gauche , Martinez et al. [2009]) et sur un cycle complet dans un cylindre (droite, Martinez [2010]).

Première partie

Équations de transport d'un écoulement diphasique à phase dispersée

Chapitre 1

Approches de modélisation d'une phase liquide dispersée

La simulation d'une phase dispersée peut être réalisée avec différentes méthodes, chacune ayant ses avantages et ses inconvénients, les rendant adaptées à certaines applications. Sur la figure 1.1, les approches sont classées selon Balachandar [2009] en fonction du nombre de Stokes et du ratio entre la taille des particules et la plus petite échelle de turbulence résolue, qui n'est pas la même en DNS (Direct Numerical Simulation) et en LES (Large Eddy Simulation ou Simulation aux Grandes Echelles (SGE)).

Ces deux grandeurs (Stokes et ratio) représentent deux aspects différents de la simulation d'une phase dispersée. Le nombre de Stokes quantifie l'équilibre entre la phase dispersée et la phase gazeuse :

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_g} \tag{1.1}$$

où $\tau_p = \rho_l S/18\pi\mu_g$ est le temps de relaxation des particules (avec $S = \pi d^2$ leur surface), et τ_g un temps caractéristique de l'écoulement gazeux (le temps de Kolmogorov ou le temps de l'échelle de coupure de la LES sur la figure 1.1). Le ratio taille des gouttes sur plus petite échelle résolue d/η (où η est l'échelle de Kolmogorov) quantifie la manière dont on doit traiter le couplage gaz-particules.

1.1 Approches directes de simulation d'une phase dispersée

Quand le rapport d/η est supérieur à 1, on doit résoudre complètement l'écoulement gazeux autour de chaque inclusion liquide ("fully resolved" sur la figure 1.1). Cette approche nécessite un maillage spécifique autour de chaque inclusion, pour bien résoudre l'écoulement. Le calcul d'un écoulement autour d'une ou plusieurs particules est faisable (Massol [2003]), mais les applications finales font intervenir un nombre tellement important de particules que la simulation à une échelle industrielle paraît complètement hors de portée de nos jours.

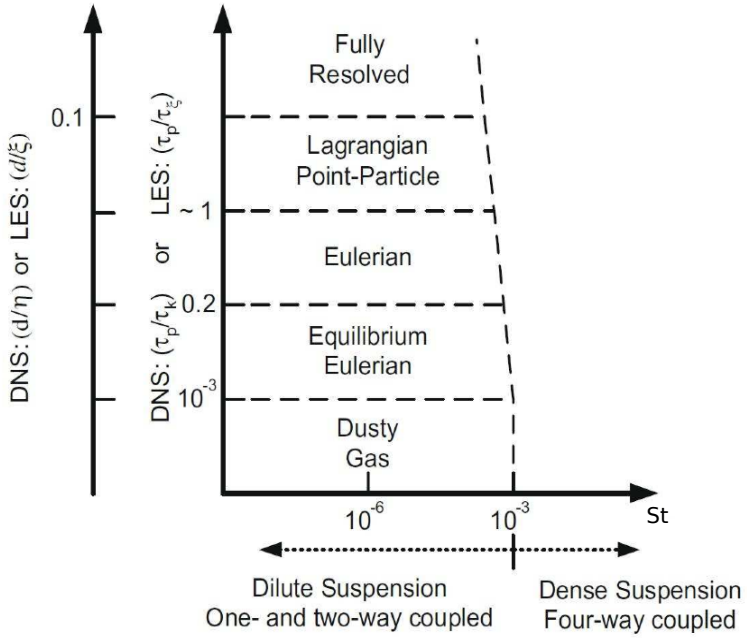


FIGURE 1.1 – Classification et domaine de validité des méthodes de résolution d'une phase dispersée selon Balachandar [2009] en fonction du nombre de Stokes et du ratio taille des particules sur plus petite échelle résolue.

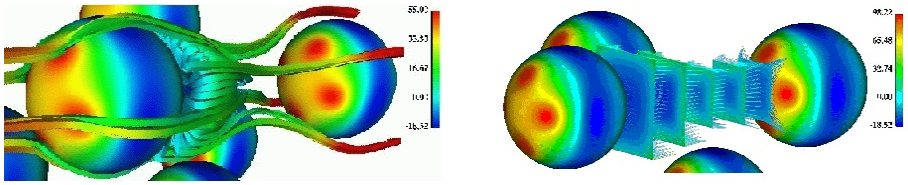


FIGURE 1.2 – Écoulement dans un réseau fixe de particules : trajectoires du gaz (gauche) et profils de vitesse (droite) (www.cerfacs.fr, Massol [2003]).

Une approche intermédiaire permettant de s'affranchir de la simulation complète de l'écoulement est la méthode FCM pour Force Coupling Method [Maxey and Patel [2001],Yeo et al. [2010]]. Dans cette méthode, la présence de la particule dans l'écoulement gazeux est prise en compte par une décomposition multi-polaire de l'écoulement autour de la particule (figure 1.3, (Abbas [2008])). Cette décomposition permet d'imposer au gaz une force qui représente la présence "volumique" de la particule. Ce genre d'approche permet de prendre en compte aussi bien des interactions hydrodynamiques (influence de l'écoulement autour d'une bulle sur une autre bulle) que des collisions. Elle permet aussi de prendre en compte d'autres forces extérieures, telle que la force électromagnétique.

Quand la taille des particules est suffisamment faible par rapport à la taille des plus petites échelles résolues, on peut utiliser des méthodes de suivi lagrangien des particules ("Lagrangian Point-Particle" sur

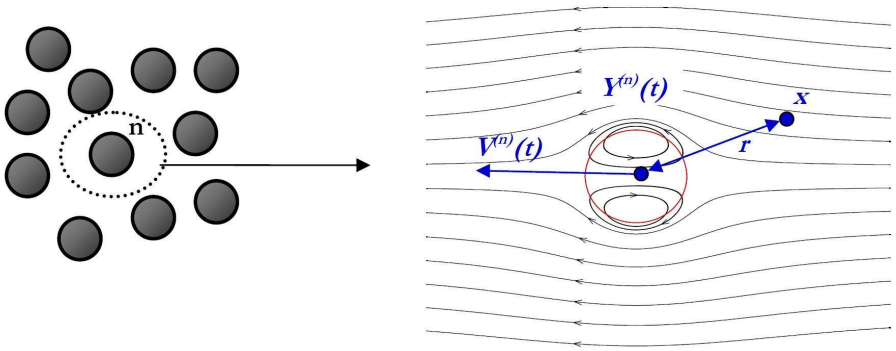


FIGURE 1.3 – Principe de la méthode de décomposition multipolaire de l'écoulement autour d'une particule (Abbas [2008]).

la figure 1.1), appelés Discrete Particle Simulation (DPS). Les particules sont assimilées à des "points" et chaque particule "physique" est suivie grâce à une particule numérique qui est régie par le système d'équations suivant, qui prédit la dynamique de la particule par un bilan de forces (Maxey and Riley [1983]) :

$$\frac{dx_{p,i}}{dt} = u_{p,i} \tag{1.2}$$

$$\frac{du_{p,i}}{dt} = \sum \frac{F_i}{m_p} \tag{1.3}$$

où x_p, $u_{p,i}$, m_p et F_i sont respectivement la position, la vitesse et la masse de la particule, et les forces extérieures exercées sur cette particule. L'intérêt de cette approche est que la modélisation des phénomènes est globalement très intuitive, et ne nécessite pas de méthodes numériques spécifiques pour résoudre le système d'équations. Cette méthode est intégrée dans de nombreux codes industriels comme IFP-C3D (Bohbot et al. [2009]) ou AVBP (Garcia [2009]). Elle a été appliquée dans de nombreux cas d'injection automobile (Reveille et al. [2006], Habchi [2008]) ou aéronautique (Sanjosé et al. [2008], Jaegle [2009], Senoner et al. [2009b], Sanjosé [2009]).

Cependant, même si le temps de calcul nécessaire pour ce genre de méthode est nettement inférieur à celui d'une approche de résolution complète de l'écoulement autour de chaque particule, le nombre de particules numériques nécessaires pour décrire de manière détaillée un spray rend cette approche très lourde pour des applications industrielles. L'augmentation du temps de calcul avec le nombre de particules impose une parallélisation de la résolution de cette phase. Cependant, dans le cas de distributions très hétérogènes, l'équilibrage de la charge de calcul entre les processeurs devient une tâche très complexe et cruciale. Entre autres, les travaux de Garcia [2009] ont permis de développer des méthodes de partitionnement spécifiques, qui se basent notamment sur un premier résultat lagrangien pour partitionner de manière efficace les calculs suivants.

Un autre problème de l'approche lagrangienne provient du couplage entre la phase dispersée et la

phase porteuse. En effet, la phase porteuse est décrite de manière continue alors que la phase dispersée est décrite de manière discrète. Il faut donc "traduire" les termes d'échanges entre les phases par interpolation qui comme toute méthode numérique induit des erreurs d'approximations. Ces méthodes imposent un biais aussi bien pour l'échange gaz-liquide (pour l'interpolation des propriétés du gaz vues par la particule) que pour l'échange liquide-gaz (pour la redistribution dans le gaz des termes sources créés par les particules). Un autre problème lié au couplage provient de la simulation de zones au maillage très fin. En effet, dans ces zones, les gouttes peuvent être plus grandes que la taille de maille. Il devient alors difficile de définir les propriétés du gaz vues par la goutte, et le couplage impose des conditions en terme de pas de temps très drastiques pour bien décrire l'échange.

1.2 Approches statistiques

1.2.1 Équation de Williams-Boltzmann

Les approches statistiques s'intéressent à une description probabiliste de la phase dispersée. Cette description est basée sur l'équation de Williams-Boltzmann (EWB) qui décrit l'évolution d'une fonction densité de probabilité (fdp) f_p d'une particule dans l'espace des phases $\{t, \vec{x}, \vec{c}_p, S, T\}$ où t est le temps, $\vec{x}$ la position, $\vec{c}_p$ la vitesse, S la surface, et T la température de la particule :

$$\frac{\partial f_p}{\partial t} + \frac{\partial c_{p,j} f_p}{\partial x_j} + \frac{1}{m_p}\frac{\partial F_{p,j} f_p}{\partial c_{p,j}} + \frac{\partial R_S f_p}{\partial S} + \frac{\partial E_T f_p}{\partial T} = 0 \tag{1.4}$$

où $F_{p,i}$ est l'ensemble des forces extérieures agissant sur la particule, R_S le terme d'évolution de la taille des particules (évaporation pour des gouttes, croissance en surface pour des suies...), et E_T le terme d'évolution de la température des particules (conduction, rayonnement...). Les termes R_S et E_T sont des quantités propres à une particule et sont définies ainsi pour le cas de l'évaporation :

$$R_S = \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{4\sqrt{\pi}}{\rho_l S^{1/2}} \dot{m}_p \tag{1.5}$$

$$E_T = \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\phi_p^c}{m_p C_{p,l}}. \tag{1.6}$$

où $\dot{m}_p$ est la variation de la masse d'une goutte de surface S, ϕ_p^c l'échange d'enthalpie par conduction entre une goutte et le gaz, et $C_{p,l}$ la capacité calorifique de la goutte (on considère ici que $C_{p,l}$ est constant en fonction de la température). Les modèles physiques utilisés pour le calcul de ces termes sont donnés dans l'annexe B. On considère des régimes suffisamment dilués pour considérer que les collisions entre gouttes sont négligeables. Le terme de droite de l'EWB est donc nul.

Le nombre de dimensions de l'espace des phases interdit une résolution en des temps raisonnables. Tout l'enjeu est donc d'utiliser une stratégie permettant de résoudre efficacement cette équation, tout en

conservant le maximum de physique. Deux types d'approches sont possibles : l'approche lagrangienne stochastique et les approches eulériennes.

1.2.2 Approche lagrangienne stochastique

L'approche lagrangienne stochastique (Dukowicz [1980]) se base sur une décomposition de la fdp f_p en une somme de particules numériques ou parcelle f_l, qui sont des solutions de l'EWB :

$$f_l = \phi_l(t,\vec{x},\vec{c}_p)\varphi_l(S)\Phi_l(T) \tag{1.7}$$

Cette décomposition fait apparaître trois termes : ϕ_p est la fdp dans l'espace physique, φ_p la fdp dans l'espace des tailles et Φ_p la fdp dans l'espace des températures. Chaque parcelle représentera donc plusieurs particules physiques de plusieurs tailles et plusieurs températures différentes, mais ayant la même position dans l'espace physique (temps, position et vitesse). L'intégration de cette fdp de parcelle donne des équations de transport de type lagrangien :

$$\frac{dM_l}{dt} = \dot{m}_p \tag{1.8}$$
$$\frac{dX_{l,i}}{dt} = V_{l,i} \tag{1.9}$$
$$\frac{dV_{l,i}}{dt} = \{\dot{c}_{p,i}\} \tag{1.10}$$
$$\frac{dT_l}{dt} = \{\dot{T}\} \tag{1.11}$$

où M_l, $X_{l,i}$, $V_{l,i}$ et T_l sont la masse, la position, la vitesse et la température de la parcelle et $\{.\}$ l'opérateur de moyenne statistique sur la parcelle. Il est à noter que si il n'y a qu'une seule particule par parcelle, la décorrélation taille/vitesse/température imposée par Eq. 1.7 n'est pas nécessaire.

1.2.3 Approches eulériennes

Au lieu de résoudre directement la fdp, les approches eulériennes s'intéressent aux moments en taille et en vitesse, qui sont des propriétés intégrées sur l'espace des phases :

$$M_S^k(\vec{x},t) = \int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}^+}\int_{\mathbb{R}^+} S^k f_p d\vec{c}_p dS dT \tag{1.12}$$
$$M_u^{ijk}(\vec{x},t) = \int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}^+}\int_{\mathbb{R}^+} c_{p,1}^i c_{p,2}^j c_{p,3}^k f_p d\vec{c}_p dS dT \tag{1.13}$$

Les moments peuvent correspondre à des quantités physiques communes. Par exemple, les moments M_S^0 et $M_S^{3/2}$ représentent respectivement la densité de masse et la densité de nombre de gouttes, alors que M_u^{100} représente la quantité de mouvement dans la direction i.

Pour obtenir les équations de conservation de ces moments, on intègre l'EWB sur les tailles, les températures et les vitesses. On obtient ainsi un système d'équations dans l'espace physique (temps et espace).

Tout l'enjeu des méthodes eulériennes réside dans le choix des hypothèses faites lors de l'intégration. La figure 1.4 montre différentes approches existantes. La notion essentielle qui détermine chaque méthode est la capacité à prédire la polydispersion de la phase dispersée pour chaque variable de l'espace des phases, à savoir la surface, la vitesse et la température. Les méthodes sont classées selon qu'elles puissent capturer la polydispersion dans telle ou telle variable, voire dans plusieurs variables à la fois. Les méthodes de quadrature sont un peu à part des autres méthodes, et seront donc détaillées séparément.

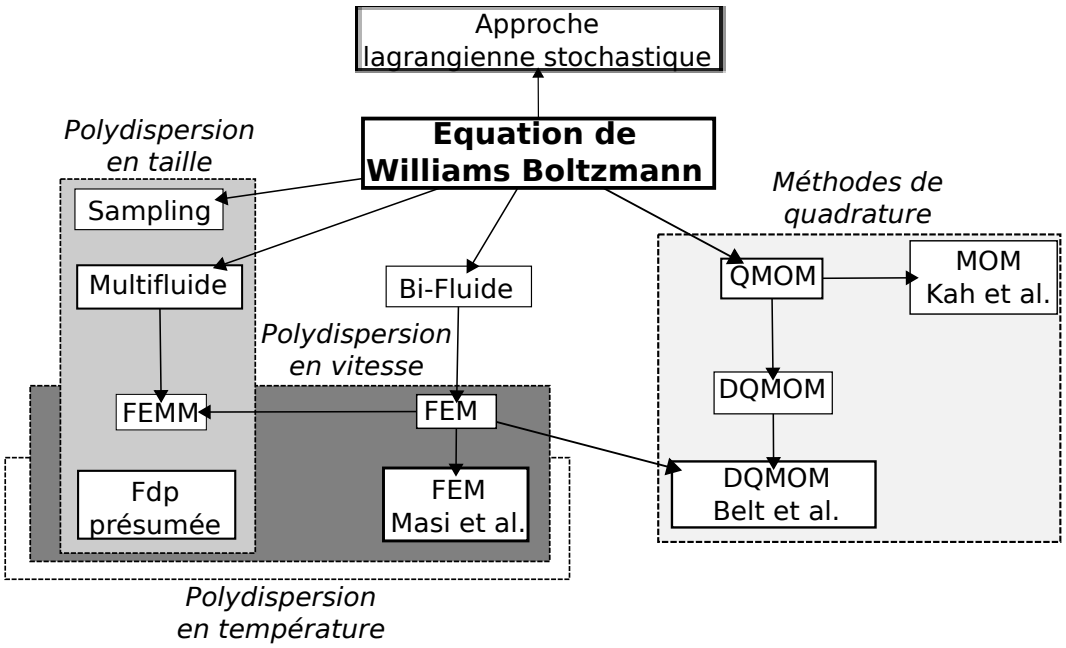


FIGURE 1.4 – Méthodes de résolution de l'équation de Williams-Boltzmann.

1.3 Approches eulériennes monodisperses en taille

1.3.1 Modèle bi-fluide

Le modèle bi-fluide est, du point de vue de la polydispersion, le plus simple des modèles eulériens (Drew and Passman [1999], Chanteperdrix et al. [2002], Murrone and Guillard [2005]). Dans cette approche, la phase dispersée est définie par deux moments en taille (la densité en nombre de goutte et la masse par exemple) et un moment en vitesse (la vitesse moyenne). Cette méthode ne prend pas en compte

la fdp en taille, réduite à un seul Dirac. Le système d'équations résultant est de type Euler :

$$\frac{\partial}{\partial t} n_l + \frac{\partial}{\partial x_m} n_l u_{l,m} = 0 \tag{1.14}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} m_l + \frac{\partial}{\partial x_m} m_l u_{l,m} = \dot{m}_p \tag{1.15}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} m_l u_{l,i} + \frac{\partial}{\partial x_m} m_l u_{l,i} u_{l,m} = \dot{m}_p u_{l,i} - m_l \{F_{d,i}\} \tag{1.16}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} m_l H_l + \frac{\partial}{\partial x_m} m_l H_l u_{l,m} = \dot{m}_p H_l + m_l C_{p,l} E_T \tag{1.17}$$

où n_l, m_l, $u_{l,i}$ et H_l sont la densité en nombre, la masse, la vitesse et l'enthalpie de la phase liquide. Le champ d'application de ce modèle simple est très réduit. Il ne s'applique qu'aux écoulements à faibles Stokes, et ne peut prendre en compte aucun caractère polydisperse.

1.3.2 Formalisme Eulérien Mésoscopique

Le Formalisme Eulérien Mésoscopique (FEM) de Février et al. [2005] est une extension du modèle bi-fluide qui permet d'étendre le domaine d'applicabilité du modèle bi-fluide à des Stokes plus élevés. Introduisant une décomposition statistique de la vitesse des particules (figure 1.5) en une partie corrélée (la vitesse mésoscopique, égale à la vitesse moyenne de la phase liquide) et une partie décorrélée (l'agitation des particules). Cette approche sera détaillée dans le chapitre 2. Elle est à la base des méthodes de traitement de l'interaction particules-turbulence en Eulérien, et a été utilisée dans de nombreuses analyses d'écoulements (Simonin and Lavieville [2002], Réveillon et al. [2002], Reeks [2005]). Dans Masi et al. [2008] et Masi et al. [2010], le même principe de décomposition est appliqué à la température.

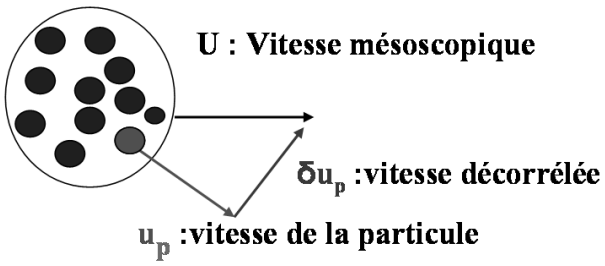


FIGURE 1.5 – Décomposition de la vitesse d'un nuage de particules en vitesse corrélée et vitesse décorrélée.

1.4 Prise en compte de la polydispersion en taille

1.4.1 Sampling

Les méthodes de Sampling se basent sur la discrétisation de l'espace en taille en plusieurs Diracs (Laurent and Massot [2001], Laurent [2002]). La fdp f_p devient alors :

$$f_p(t,\vec{x},\vec{c}_p,S,T) = \sum_{k=1,N} n_l^{(k)}(t,\vec{x})\delta(\vec{c}_p - \vec{U}_l^{(k)})\delta(S - S_l^{(k)})\delta(T - T_l^{(k)}) \tag{1.18}$$

où $n_l^{(k)}$, $\vec{U}_l^{(k)}$, $S_l^{(k)}$ et $T_l^{(k)}$ sont la densité de nombre de gouttes, la vitesse, la surface et la température associés à chaque Dirac, et N le nombre de Diracs. Une fois la condition initiale et/ou les conditions aux limites discrétisées, chaque Dirac correspond à un fluide, et est transporté indépendamment des autres. Cela revient à calculer autant de bi-fluides que de Diracs, et permet de capturer la polydispersion en taille.

1.4.2 Fdp présumée

Les méthodes à fdp présumée (Babinsky and Sojka [2002], Mossa [2005]) consistent à présumer les distributions en taille, en température et en vitesse, et à intégrer l'EWB sur l'espace des tailles, des vitesses et des températures avec ces distributions. La justification de cette méthode est que dans la plupart des applications la forme de la fdp n'évolue pas beaucoup, et qu'il peut donc être efficace de la définir a priori. Dans Mossa [2005], la fdp en taille est supposée log-normale, alors que les fdp en vitesse et température sont supposées gaussiennes (ici la variable de taille est le diamètre d) :

$$f_p(d) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\ln(\sigma_{LN})d}\exp\left(-\frac{1}{2}\frac{\ln\left(\frac{d}{D}\right)^2}{\ln(\sigma_{LN})^2}\right) \tag{1.19}$$

où σ_{LN} et D sont les paramètres de la distribution. Plusieurs inconvénients de cette méthode ont été montrés dans Mossa [2005]. Le plus important de tous est que la fonction log-normale utilisée pour approcher la fdp ne permet de bien reproduire le phénomène d'évaporation. En effet, cette fdp impose un nombre de gouttes tendant vers 0 quand la taille des gouttes tend vers 0, ce qui impose un flux nul de disparition des gouttes en 0, et qui contraint fortement l'évolution de la fdp.

1.4.3 Approche Multi-fluide

L'approche multi-fluide (Laurent and Massot [2001], Massot [2007], de Chaisemartin [2009]) discrétise l'espace des tailles en sections continues (figure 1.6). L'intégration de l'EWB conduit alors à un système à N fluides, couplés par les phénomènes faisant varier la taille des gouttes (atomisation, évaporation, coalescence). Les détails de la dérivation de cette méthode seront donnés au chapitre 2.2.3.

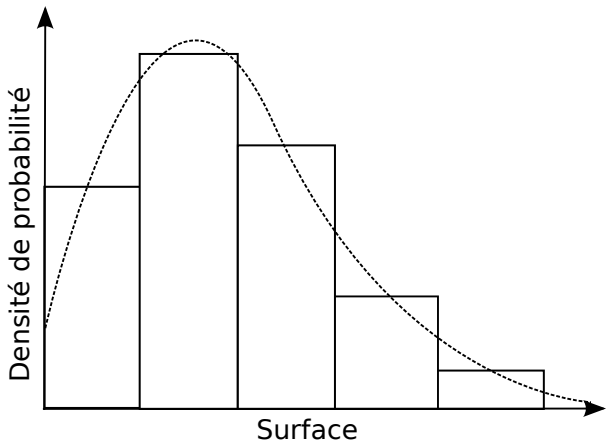


FIGURE 1.6 – Fonction densité de probabilité réelle (ligne pointillée) et représentation sectionnelle (ligne continue).

1.5 Les méthodes de quadrature

Pour reproduire une distribution, que ce soit une distribution en taille, en température, ou en vitesse, il faut vérifier le maximum de moments de cette distribution. On est donc tenté d'en prendre un maximum. Nous prenons ici l'exemple d'une EWB réduite au cas monodimensionnel sans variation de vitesse et de surface (mais les idées sont identiques pour le traitement de moments en taille par exemple) :

$$\frac{\partial f_p}{\partial t} + \frac{\partial c_p f_p}{\partial x} = 0 \tag{1.20}$$

Si on intègre cette équation sur les vitesses, on obtient le système suivant pour $k = 1, N$ moments (pour un cas 1D, les moments en vitesse M_u^{ijk} sont réduits à $M_u^k = M_u^{00k}$) :

$$\frac{\partial M_u^k}{\partial t} + \frac{\partial M_u^{k+1}}{\partial x} = 0 \tag{1.21}$$

Dans le cas où on n'a qu'une seule vitesse pour chaque position, cela ne pose pas de problème. En effet si on connait 2 moments, on peut définir tous les moments d'ordre supérieur. Considérons la distribution suivante monodisperse :

$$f_p(t,S) = n_l.\delta(c_p - U_l) \tag{1.22}$$

U_l et n_l sont la vitesse des gouttes et la densité de nombre de la phase dispersée. Si on transporte deux moments, on peut vérifier :

$$M_u^0 = \int n_l.\delta(c_p - U_l)dc_p = n_l \tag{1.23}$$

$$M_u^1 = \int c_p.n_l.\delta(c_p - U_l)dc_p = n_l.U_l \tag{1.24}$$

$$\tag{1.25}$$

On peut donc reconstruire la fdp. Tous les moments supérieurs s'obtiennent alors facilement :

$$M_u^k = \int c_p^k . n_l . \delta(c_p - U_l) dc_p = U_l^k . n_l \tag{1.26}$$

Cependant, les moments d'ordre supérieur ont peu d'intérêt pour une distribution monodisperse, étant donné que seuls deux moments suffisent.

1.5.1 Approche QMOM

Dans le cas de distribution de vitesse inconnue a priori, on ne peut pas reconstruire directement les moments supérieurs et le flux convectif. C'est ici qu'interviennent les méthodes de quadratures. L'approche QMOM (Quadrature Method of Moment, McGraw [1997], Marchisio et al. [2003]) se base sur une reconstruction de la fdp par une quadrature de Gauss. En restant dans le cas simplifié décrit précédemment, la fdp est donc :

$$f_p = \sum_{j=1,N} w_j \delta(c_p - U_{l,j}) \tag{1.27}$$

où N est le nombre de points de quadrature. Si le nombre de points de quadrature est N, alors cette reconstruction vérifie 2N moments, et inversement il faut 2N moments pour la reconstruire. De manière analogue à ce qui a été montré précédemment pour une distribution monodisperse, quand la fdp est connue, tous les moments de la fdp le sont aussi :

$$M_U^k = \int c_p^k . \sum_{j=1,N} w_j \delta(c_p - U_{l,j}) dc_p = \sum_{j=1,N} w_j . U_{l,j}^{j-1} \tag{1.28}$$

C'est ce système non-linéaire qui permet, en connaissant les moments, de retrouver les couples poids-abscisse. En effet, si on connait 2N moments, on a un système à 2N équations (autant que de moments) et 2N inconnues (N pour les poids et N pour les abscisses). Des méthodes existent pour faciliter la projection des moments sur la quadrature (McGraw [1997]), basées sur l'algorithme product-difference (PD) de Gordon [1968], et sur la théorie des moments canoniques (Dette and Studden [1997]).

Une application intéressante de cette méthode est le traitement des croisements de gouttes. En effet, si deux "paquets de gouttes" se croisent, dans une approche monocinétique (une vitesse par position), la vitesse locale devient la moyenne des vitesses de chaque paquet, et on n'aura donc plus qu'un seul paquet. Pour arriver à simuler ce croisement, la méthode de quadrature est particulièrement appropriée (de Chaisemartin et al. [2008], de Chaisemartin et al. [2009b]). En effet, si à une certaine position, il n'y a qu'une seule vitesse, alors la distribution de vitesse est un Dirac. Si il y a deux vitesses, il y a deux Diracs. On voit donc bien que la quadrature reproduit naturellement cette distribution, et permet de réécrire le terme de transport de manière à utiliser un schéma convectif par Dirac :

$$\frac{\partial M_u^{k+1}}{\partial x} = \sum_{j=1,N} \frac{\partial U_{l,j} M_u^k}{\partial x} \tag{1.29}$$

Pour pouvoir simuler un croisement de deux trajectoires, il faudra donc avoir 4 moments en vitesse 1D (nécessaires à la reconstruction de la distribution). Ce nombre de moments nécessaire augmente bien sûr avec le nombre de dimension.

1.5.2 Approche DQMOM

Comme pour le QMOM, l'approche DQMOM (Direct Quadrature Method of Moment, Marchisio and Fox [2005]) se base sur une quadrature de Gauss de la fdp. La différence est qu'on ne transporte pas les moments, mais directement les poids et abscisses de la quadrature. Chaque couple poids/abscisse correspond alors à un fluide eulérien :

$$\frac{\partial}{\partial t} w_j + \frac{\partial}{\partial x_m} w_j U_{j,m} = a_j \tag{1.30}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} w_j S_j + \frac{\partial}{\partial x_m} w_j S_p U_{j,m} = b_j \tag{1.31}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} w_j S_j U_{j,i} + \frac{\partial}{\partial x_m} w_j S_p U_{j,i} U_{j,m} = c_j \tag{1.32}$$

$$\tag{1.33}$$

Les termes sources a_p, b_p et c_p sont déterminés en insérant la quadrature de la fdp dans l'équation de Williams-Boltzmann (Marchisio and Fox [2005]). Cela revient en pratique à transporter N diracs. A la différence de la méthode de sampling, ces Diracs sont couplés par un système linéaire lorsque les phénomènes physiques font évoluer la taille des gouttes (coalescence, atomisation, évaporation). Fox et al. [2008] a montré l'efficacité de cette méthode pour la simulation des processus de coalescence et d'évaporation, mais a aussi soulevé le problème du flux de nombre de gouttes en 0, qui est résolu dans Massot et al. [2010]. Cette approche a récemment été étendue aux cas turbulents par Belt and Simonin [2009] par la prise en compte d'une dispersion en vitesse pour chaque abscisse de la quadrature. Ce nouveau formalisme a été appliqué à des cas de coalescence en Turbulence Homogène Isotrope (Wunsch et al. [2009]).

1.5.3 Méthode de Moments d'ordre élevé

Le problème des méthodes de quadrature est qu'étant donné qu'elle approche la fdp par des Diracs, la distribution n'est pas continue. Dans le cas de l'évaporation, cela pose problème parce qu'elles ne peuvent simuler correctement le flux de disparition des gouttes à la surface 0 (Fox et al. [2008]). En effet l'évaporation d'une fdp continue fait disparaître des gouttes de manière continue quand elles ont une surface nulle. Dans le cas d'une quadrature, le seul moyen pour "perdre" des gouttes est qu'un Dirac soit de surface nulle. On aura donc un flux de disparition des gouttes discontinu, ce qui ne serait pas physique.

L'approche développée dans Kah et al. [2009] et Massot et al. [2010] propose de résoudre ce problème. Elle se base sur une reconstruction continue de la fdp avec N moments. La forme de la reconstruction choisie est de type exponentiel :

$$n_l(S) = exp\left(-\sum_{j=0}^{N} \xi_j S^j\right) \tag{1.34}$$

Les paramètres ξ_j de la reconstruction sont obtenus en maximisant l'entropie de Shannon $\mathbf{H}$:

$$\mathbf{H}(n_l) = -\int_{S_{min}}^{S_{max}} n_l(S)\ln(n_l(S))dS \tag{1.35}$$

Cette maximisation d'entropie permet de choisir parmi tous les ξ_j les combinaisons vérifiant les moments de la fdp qui donnent la solution la plus régulière. Le système résultant est non-linéaire et nécessite de calculer numériquement les intégrales qu'il fait intervenir, comme expliqué dans Massot et al. [2010]. L'intérêt est qu'en reconstruisant la fdp en taille de manière continue, on peut calculer le flux de gouttes qui disparaissent (concrètement toutes celles qui deviennent de surface nulle pendant un pas de temps). Avec la connaissance de ce flux, on peut alors utiliser une méthode de quadrature, mais en ajoutant ce nouveau flux dans l'équation de nombre de gouttes.

1.6 Quelle approche choisir ?

Le choix de la méthode de polydispersion est contraint par le fait que l'approche choisie doit pouvoir être appliquée avec les méthodes numériques présentes dans AVBP . Sous ces contraintes, les méthodes de quadrature ne peuvent être utilisées, ces dernières nécessitant une précision sur le transport simultané de plusieurs moments de la fdp (Wright [2007], Kah et al. [2009]). Le choix s'est ici porté sur les approches multi-fluides parce qu'elles reviennent à calculer N phases eulériennes, couplées seulement par l'évaporation. La représentation continue de la fdp fait que cette approche est plus adaptée que le sampling, qui ne peut prédire le flux en 0, du fait d'une représentation discrète de la fdp.

Dans le chapitre suivant, on propose donc un couplage entre le FEM et l'approche multi-fluide, appelé FEMM pour Formalisme Eulérien Mésoscopique Multi-fluide.

Chapitre 2

Le Formalisme Eulérien Mésoscopique : extension aux écoulements polydisperses

2.1 Le Formalisme Eulérien Mésoscopique

2.1.1 Dérivation

Pour résoudre l'EWB, on définit les opérateurs de moyenne statistique et massique :

$$n_l(\vec{x},t) = \int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}^+}\int_{\mathbb{R}^+} f_p(t,\vec{x},\vec{c}_p,S,T)d\vec{c}_p dSdT \tag{2.1}$$

$$m_l(\vec{x},t) = \int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}^+}\int_{\mathbb{R}^+} m_p f_p(t,\vec{x},\vec{c}_p,S,T)d\vec{c}_p dSdT \tag{2.2}$$

$$\{\Psi\} = \frac{1}{n_l(x,t)}\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}^+}\int_{\mathbb{R}^+} \Psi f_p(t,\vec{x},\vec{c}_p,S,T)d\vec{c}_p dSdT \tag{2.3}$$

$$<\Psi> = \frac{1}{m_l(x,t)}\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}^+}\int_{\mathbb{R}^+} m_p\Psi f_p(t,\vec{x},\vec{c}_p,S,T)d\vec{c}_p dSdT \tag{2.4}$$

où $m_p = \rho_l S^{3/2}/6\sqrt{\pi}$ la masse d'une particule. Dans le cas monodisperse du FEM, les deux opérateurs sont identiques. On peut définir les grandeurs moyennes de la phase dispersée :

$$u_{l,i}(\vec{x},t) = \{c_{p,i}\} \tag{2.5}$$

$$H_l(\vec{x},t) = \{C_{p,l}T\} \tag{2.6}$$

Dans le FEM classique, il n'y a pas de dispersion en taille et en température (distribution de type Dirac), il n'y a donc localement qu'une seule taille et une seule température de gouttes. Par contre, considérant un ensemble statistique de réalisations de la phase dispersée, une dispersion statistique de la vitesse est prise en compte grâce à la décomposition de la vitesse des gouttes en une partie corrélée et une partie décorrélée :

$$c_{p,i} = u_{l,i}(\vec{x},t) + \delta c_{p,i}(\vec{x},t) \tag{2.7}$$

$\delta c_{p,i}$ représente la dispersion du champ de vitesse des particules. On peut définir les quantités moyennes suivantes :

$$\delta R_{p,ij} = \frac{1}{n_l(\vec{x},t)} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}^+} \int_{\mathbb{R}^+} \delta c_{p,i} \delta c_{p,j} f_p(t,\vec{x},\vec{c}_p,S,T) d\vec{c}_p dS dT \tag{2.8}$$

$$\delta \Theta_l = \frac{1}{2n_l(\vec{x},t)} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}^+} \int_{\mathbb{R}^+} \delta c_{p,i}^2 f_p(t,\vec{x},\vec{c}_p,S,T) d\vec{c}_p dS dT \tag{2.9}$$

$$\delta S_{p,ijk} = \frac{1}{n_l(\vec{x},t)} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}^+} \int_{\mathbb{R}^+} \delta c_{p,i} \delta c_{p,j} \delta c_{p,k} f_p(t,\vec{x},\vec{c}_p,S,T) d\vec{c}_p dS dT \tag{2.10}$$

où $\delta R_{p,ij}$, $\delta S_{p,ijk}$ et $\delta \Theta_l$ sont les tenseurs de second et troisième ordre, et l'énergie du mouvement décorrélé. En multipliant l'EWB par une fonction quelconque Ψ et en intégrant sur tout l'espace des phases, on obtient l'équation de Enskog suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} n_l \{\Psi\} + \frac{\partial}{\partial x_j} n_l u_{l,j} \{\Psi\} &= n_l \left\{ F_{d,j} \frac{\partial \Psi}{\partial c_{p,j}} \right\} + n_l \left\{ E_T \frac{\partial \Psi}{\partial T} \right\} + n_l \left\{ R_S \frac{\partial \Psi}{\partial S} \right\} \\ &\quad + n_l \left\{ \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\} + n_l \left\{ c_{p,j} \frac{\partial \Psi}{\partial x_j} \right\} - \frac{\partial}{\partial x_j} n_l \left\{ \delta c_{p,j} \Psi \right\} \end{aligned} \tag{2.11}$$

En remplaçant Ψ par 1, m_p, $m_p c_{p,i}$, $m_p \delta c_{p,i} \delta c_{p,i}$, $m_p C_{p,l} T$, on obtient les équations du FEM :

$$\frac{\partial}{\partial t} n_l + \frac{\partial}{\partial x_m} n_l u_{l,m} = 0 \tag{2.12}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} m_l + \frac{\partial}{\partial x_m} m_l u_{l,m} = \dot{m}_p \tag{2.13}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} m_l u_{l,i} + \frac{\partial}{\partial x_m} m_l u_{l,i} u_{l,m} = \dot{m}_p u_{l,i} - m_l \{F_{d,i}\} - \frac{\partial}{\partial x_m} m_l \delta R_{l,im} \tag{2.14}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} m_l \delta \Theta_l + \frac{\partial}{\partial x_m} m_l \delta \Theta_l u_{l,m} = \dot{m}_p \delta \Theta_l - m_l \{F_{d,m} \delta c_{p,m}\} - m_l \delta R_{p,im} \frac{\partial U_{l,i}}{\partial x_m} - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_m} m_l S_{p,iim} \tag{2.15}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} m_l H_l + \frac{\partial}{\partial x_m} m_l H_l u_{l,m} = \dot{m}_p H_l + m_l C_{p,l} E_T \tag{2.16}$$

2.1.2 Termes sources de traînée

Les termes sources $-m_l\{F_{d,i}\}$ et $-m_l\{F_{d,m}\delta c_{p,m}\}$ sont évalués avec une loi de type traînée de Stokes :

$$\{F_{d,i}\} = \left\{ \frac{c_{p,i} - U_{g,i@p}}{\tau_p} \right\} = \frac{U_{l,i} - U_{g,i}}{\tau_p} \tag{2.17}$$

$$\{F_{d,m} \delta c_{p,m}\} = \left\{ \frac{c_{p,m} - U_{g,m@p}}{\tau_p} \delta c_{p,m} \right\} = \frac{2}{\tau_p} \delta \Theta_l \tag{2.18}$$

où $U_{g,m@p}$ est la vitesse du gaz à la position de la particule, et où $\tau_p = \rho_l d^2 / 18 \mu_g \left(1 + 0.15 Re_d^{0.687}\right)$ et $Re_d = \sqrt{u_{l,i}^2} d / \nu_g$.

2.1.3 Modèles de fermeture des corrélations doubles et triples en vitesse

Les équations de quantité de mouvement et d'énergie décorrélée font intervenir les tenseurs de deuxième et troisième ordres en vitesse décorrélée. Il est donc nécessaire de définir des fermetures.

Les détails de ces fermetures sont disponibles dans Kaufmann et al. [2004], Kaufmann et al. [2008] et Riber [2007]. Le tenseur $\delta R_{p,ij}$ est décomposé en une partie sphérique et une partie déviatrice :

$$\delta R_{p,ij} = \frac{\delta R_{p,ii}}{3}\delta_{ij} + \delta R^*_{p,ij} = P_{RUM}\delta_{ij} + \delta R^*_{p,ij} \tag{2.19}$$

où $P_{RUM} = 2/3\delta\Theta_l$. La partie déviatrice est modélisée par une hypothèse de viscosité :

$$\delta R^*_{p,ij} = -\nu_{RUM}\left(\frac{\partial u_{l,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_{l,i}}{\partial x_j} - \frac{2}{3}\frac{\partial u_{l,k}}{\partial x_k}\delta_{ij}\right) \tag{2.20}$$

où $\nu_{RUM} = \tau_p\delta\Theta_l/3$. Le tenseur de troisième ordre $\delta S_{l,iij}$ est quant à lui modélisé avec une hypothèse de type loi de Fick :

$$\delta S_{p,iij} = -\kappa_{RUM}\frac{\partial\delta\Theta_l}{\partial x_j} \tag{2.21}$$

où $\kappa_{RUM} = 10/27\tau_p\delta\Theta_l$. La validation a priori de ces fermetures a été effectuée en Turbulence Homogène Isotrope (THI) par Moreau [2006], et montrait des résultats satisfaisants. Des validations a posteriori ont été effectuées en THI par Riber [2007] et Roux [2009] avec le code AVBP , et ont montré une forte influence de la méthode numérique utilisée sur les résultats. Une validation avec des méthodes numériques mieux adaptées est proposée dans le chapitre 4 (Vié et al. [2009]).

2.1.4 Système d'équations final

$$\frac{\partial}{\partial t}n_l + \frac{\partial}{\partial x_m}n_l u_{l,m} = 0 \tag{2.22}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}m_l + \frac{\partial}{\partial x_m}m_l u_{l,m} = \dot{m}_p \tag{2.23}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}m_l u_{l,i} + \frac{\partial}{\partial x_m}m_l u_{l,i}u_{l,m} = \dot{m}_p u_{l,i} - m_l\frac{u_{l,i} - u_{g@l}}{\tau_p} - \frac{\partial}{\partial x_m}m_l\delta R_{p,im} \tag{2.24}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}m_l\delta\Theta_l + \frac{\partial}{\partial x_m}m_l\delta\Theta_l u_{l,m} = \dot{m}_p\delta\Theta_l - 2m_l\frac{\delta\Theta_l}{\tau_p} - m_l\delta R_{p,im}\frac{\partial U_{l,i}}{\partial x_m} - \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x_m}m_l\delta S_{p,iim} \tag{2.25}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}m_l H_l + \frac{\partial}{\partial x_m}m_l H_l u_{l,m} = \dot{m}_p H_l + m_l C_{p,l}E_T \tag{2.26}$$

2.2 Dérivation du Formalisme Eulérien Mésoscopique Multi-fluide

Le FEM ne prend pas en compte la polydispersion en taille des gouttes. Pour prendre en compte cette polydispersion, il est proposé de coupler ce formalisme à l'approche multi-fluide de Laurent and Massot [2001]. Considérant que ces deux approches tendent à résoudre deux dimensions différentes de l'espace des phases, la dérivation du Formalisme Eulérien Mésoscopique Multi-fluide (FEMM) ne pose pas de difficulté particulière, même si quelques précautions doivent être prises avec les quantités transportées. Cette idée de conditionner les statistiques de la phase dispersée en fonction de la taille des particules a déjà été explorée par Massot et al. [2004], et est à la base de l'écriture du FEMM.

L'approche multi-fluide se base sur le sectionnement de l'espace des tailles en N intervalles $[S_p, S_{p+1}]$ appelés sections d'après Greenberg et al. [1993]. On définit la taille moyenne d'une section $S_m^{(p)}$:

$$S_m^{(p)} = \frac{S_p + S_{p+1}}{2} \tag{2.27}$$

Pour intégrer l'EWB avec l'hypothèse d'un sectionnement de l'espace des tailles, deux opérateurs de moyenne sont définis :

$$m_l^{(p)}(\vec{x},t) = \int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}^+}\int_{S_p}^{S_{p+1}} m_p f_p d\vec{c}_p dT dS \tag{2.28}$$

$$n_l^{(p)}(\vec{x},t) = \int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}^+}\int_{S_p}^{S_{p+1}} f_p d\vec{c}_p dT dS \tag{2.29}$$

$$n_l(\vec{x},t,S) = \int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}^+} f_p d\vec{c}_p dT \tag{2.30}$$

$$<\Psi>^{(p)} = \frac{1}{m_l^{(p)}}\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}^+}\int_{S_p}^{S_{p+1}} m_p \Psi f_p d\vec{c}_p dT dS \tag{2.31}$$

$$\{\Psi\}^{(p)} = \frac{1}{n_l^{(p)}}\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}^+}\int_{S_p}^{S_{p+1}} \Psi f_p d\vec{c}_p dT dS \tag{2.32}$$

où l'exposant (p) désigne des quantités intégrées sur la section p.

La décomposition des vitesses en parties corrélée et décorrélée est faite avec l'opérateur de moyenne massique :

$$U_{l,i}^{(p)} = <c_{p,i}>^{(p)} = \frac{1}{m_l^{(p)}}\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}^+}\int_{S_p}^{S_{p+1}} \frac{\rho_l S^{3/2}}{6\sqrt{\pi}} c_{p,i} f_p dc_p dT dS \tag{2.33}$$

$$\delta c_{p,i}^{(p)}(\vec{x},t,S) = c_{p,i} - <c_{p,i}>^{(p)} = c_{p,i} - U_{l,i}^{(p)} \tag{2.34}$$

$$\left\langle \delta c_{p,i}^{(p)}(\vec{x},t,S)\right\rangle^{(p)} = 0 \tag{2.35}$$

Elle permet de définir des tenseurs similaires à ceux du FEM monodisperse mais obtenus par moyenne massique :

$$\begin{aligned}
\delta R_{l,ij}^{(p)}(\vec{x},t,S) &= <\delta c_{p,i}^{(p)} \delta c_{p,j}^{(p)}>^{(p)} \\
\delta\Theta_l^{(p)}(\vec{x},t,S) &= \delta R_{l,ii}^{(p)}(\vec{x},t,S)/2 \\
\delta S_{l,ijk}^{(p)}(\vec{x},t,S) &= <\delta c_{p,i}^{(p)} \delta c_{p,j}^{(p)} \delta c_{p,k}^{(p)}>^{(p)}
\end{aligned}$$

En multipliant l'EWB par une fonction Ψ quelconque, et en intégrant massiquement sur les vitesses, les températures et les tailles, l'équation suivante est obtenue :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} m_l^{(p)} \langle\Psi\rangle^{(p)} + \frac{\partial}{\partial x_j} m_l^{(p)} u_{l,j}^{(p)} \langle\Psi\rangle^{(p)} =& m_l^{(p)} \langle F_{d,j} \frac{\partial\Psi}{\partial c_{p,j}}\rangle^{(p)} + m_l^{(p)} \langle E_T \frac{\partial\Psi}{\partial T}\rangle^{(p)} \\
&+ m_l^{(p)} \langle \frac{\partial\Psi}{\partial t}\rangle^{(p)} + m_l^{(p)} \langle c_{p,j} \frac{\partial\Psi}{\partial x_j}\rangle^{(p)} - \frac{\partial}{\partial x_j} m_l^{(p)} \langle \delta c_{p,j}\Psi\rangle^{(p)} \\
&- \left[R_S m_p \int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}^+} \Psi f_p d\vec{c}_p dT \right]_{S_p}^{S_{p+1}} + n_l^{(p)} \left\{ R_S \frac{\partial}{\partial S}(m_p\Psi)\right\}
\end{aligned} \tag{2.36}$$

Les termes d'évaporation sont regroupés et seront explicités séparément :

$$E^{(p)}(\Psi) = -\left[R_S m_p \int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}^+} \Psi f_p d\vec{c}_p dT\right]_{S_p}^{S_{p+1}} + n_l^{(p)}\left\{R_S \frac{\partial}{\partial S}(m_p\Psi)\right\}^{(p)} \tag{2.37}$$

En remplaçant Ψ par $1/m_p$, 1, $c_{p,i}$, $\delta c_{p,i}^{(p)}\delta c_{p,i}^{(p)}$ et $C_{p,l}T$, on obtient le système multi-fluide suivant :

$$\frac{\partial}{\partial t}n_l^{(p)} + \frac{\partial}{\partial x_m}n_l^{(p)}u_{l,m}^{(p)} = -E^{(p)}(\frac{1}{m_p}) - \frac{\partial}{\partial x_m}n_l^{(p)}\left\{\delta c_{l,m}^{(p)}\right\}^{(p)} \tag{2.38}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}m_l^{(p)} + \frac{\partial}{\partial x_m}m_l^{(p)}u_{l,m}^{(p)} = E^{(p)}(1) \tag{2.39}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}m_l^{(p)}u_{l,i}^{(p)} + \frac{\partial}{\partial x_m}m_l^{(p)}u_{l,i}^{(p)}u_{l,m}^{(p)} = E^{(p)}(c_{p,i}) - m_l^{(p)} < F_{d,i} >^{(p)} - \frac{\partial}{\partial x_m}m_l^{(p)}\delta R_{l,im}^{(p)} \tag{2.40}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}m_l^{(p)}\delta\Theta_l^{(p)} + \frac{\partial}{\partial x_m}m_l^{(p)}\delta\Theta_l^{(p)}u_{l,m}^{(p)} &= E^{(p)}(\delta\Theta_l^{(p)}) - m_l^{(p)} < F_{d,m}\delta c_{p,m} >^{(p)} \\ &\quad -m_l^{(p)}\delta R_{p,im}^{(p)}\frac{\partial U_{l,i}^{(p)}}{\partial x_m} - \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x_m}m_l^{(p)}\delta S_{p,iim}\end{aligned} \tag{2.41}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}m_l^{(p)}H_l^{(p)} + \frac{\partial}{\partial x_m}m_l^{(p)}H_l^{(p)}u_{l,m}^{(p)} = E^{(p)}(h_l) + m_l^{(p)}C_{p,l}E_T^{(p)} \tag{2.42}$$

2.2.1 Termes sources de traînée

Pour le FEMM, les termes sources $-m_l^{(p)} < F_{d,i} >$ et $-m_l^{(p)} < F_{d,m}\delta c_{p,m} >$ font intervenir des corrélations taille/vitesse et sont approchés avec les expressions suivantes :

$$< F_{d,i} >^{(p)} = \left\langle \frac{c_{p,i} - U_{g,i@l}}{\tau_p} \right\rangle^{(p)} \approx \frac{U_{l,i}^{(p)} - U_{g,i@l}}{\tau_p^{(p)}} \tag{2.43}$$

$$< F_{d,i}\delta c_{p,m} >^{(p)} = \left\langle \frac{c_{p,i} - U_{g,i@l}}{\tau_p}\delta c_{p,m} \right\rangle^{(p)} \approx \frac{2}{\tau_p^{(p)}}\delta\Theta_l^{(p)} \tag{2.44}$$

où $\tau_p^{(p)} = \rho_l S_m^{(p)}/18\pi\mu_g\left(1 + 0.15{Re_d^{(p)}}^{0.687}\right)$ et et $Re_d = \sqrt{(u_{l,i}^{(p)})^2}\sqrt{S_m^{(p)}}/\sqrt{\pi}\nu_g$.

2.2.2 Modèles de fermeture des corrélations doubles et triples en vitesse

Considérant que, du point de vue de l'espace physique, chaque section se comporte comme une phase eulérienne équivalente à celle du FEM, les mêmes fermetures sont utilisées pour le FEMM :

$$\delta R_{p,ij}^{(p)} = \frac{\delta R_{p,ii}^{(p)}}{3}\delta_{ij} + \delta R_{p,ij}^{(p)*} = P_{RUM}^{(p)}\delta_{ij} + \delta R_{p,ij}^{(p)*} \tag{2.45}$$

où $P_{RUM}^{(p)} = 2/3\delta\Theta_l^{(p)}$. La partie déviatrice est modélisée par une hypothèse de viscosité :

$$\delta R_{p,ij}^{(p)*} = -\nu_{RUM}^{(p)}\left(\frac{\partial u_{l,i}^{(p)}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_{l,i}^{(p)}}{\partial x_j} - \frac{2}{3}\frac{\partial u_{l,k}^{(p)}}{\partial x_k}\delta_{ij}\right) \tag{2.46}$$

où $\nu_{RUM}^{(p)} = \tau_p^{(p)} \delta\Theta_l^{(p)}/3$. Le tenseur de troisième ordre $\delta S_{l,iij}^{(p)}$ est quant à lui modélisé avec une hypothèse de type loi de Fick :

$$\delta S_{p,iij}^{(p)} = -\kappa_{RUM}^{(p)} \frac{\partial \delta\Theta_l^{(p)}}{\partial x_j} \tag{2.47}$$

où $\kappa_{RUM}^{(p)} = 10/27 \tau_p^{(p)} \delta\Theta_l^{(p)}$.

2.2.3 Termes sources d'évaporation

Une nouvelle moyenne est définie :

$$\{\Psi\}^S = \frac{1}{n_l(S)} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}^+} \Psi f_p d\vec{c}_p dT \tag{2.48}$$

Elle permet d'écrire $E^{(p)}(\Psi)$ sous la forme suivante si Ψ ne dépend pas de S :

$$E^{(p)}(\Psi) = -\left[R_S m_p n_l(S) \{\Psi\}^S\right]_{S_p}^{S_{p+1}} + \int_{S_p}^{S_{p+1}} R_S n_l(S) \{\Psi\}^S \frac{\partial}{\partial S}(m_p) dS \tag{2.49}$$

La fermeture des termes sources d'évaporation $E^{(p)}(\Psi)$ nécessite donc de connaître la valeur du nombre de gouttes et de Ψ en tout point de l'espace des tailles.

On définit les moments en taille de chaque section :

$$M^k = \int_{S_p}^{S_{p+1}} S^k n_l(S) dS \tag{2.50}$$

Tout l'enjeu de l'approche multi-fluide repose dans le choix d'une reconstruction de la fdp en taille $n_l(S)$. Cette reconstruction est faite à partir des moments qui sont transportés. Le nombre de paramètres de la reconstruction définit le nombre de moments à transporter, et il définit aussi (voire surtout) les propriétés numériques de la méthode. On traitera ici des méthodes d'ordre 1 (un moment en taille transporté) et d'ordre 2 (deux moments en taille transportés). Un deuxième enjeu de l'approche multi-fluide est la méthode utilisée pour traiter le transport dans l'espace des tailles. Pour une méthode d'ordre 1, une approche de type volumes finis classique suffit. Pour les méthodes d'ordre 2, un schéma de type cinétique doit être utilisé (Bouchut et al. [2003], de Chaisemartin [2009]). Ce type de schéma se base sur le transport exact au niveau cinétique de la fdp reconstruite.

Approche Multi-fluide d'ordre 1

Un seul moment en taille est transporté. La reconstruction de $n_l(S)$ se fait donc avec une fonction à un paramètre. Le choix du moment à transporter et de la forme de la reconstruction est discuté dans Laurent [2006]. Il s'avère que le plus intéressant est le moment $3/2$, étant donné qu'il représente la masse. Dans toute la suite, on fait l'hypothèse que les vitesses corrélée et décorrélée et la température ne varient pas

dans chaque section :

$$\{c_{p,i}\}^S = \langle c_{p,i}\rangle^{(p)} = U_{l,i}^p \tag{2.51}$$

$$\{\delta c_{p,i}\delta c_{p,i}\}^S = \langle \delta c_{p,i}\delta c_{p,i}\rangle^{(p)} = \Theta_l^p \tag{2.52}$$

$$\{C_{p,l}T\}^S = \langle C_{p,l}T\rangle^{(p)} = H_l^p \tag{2.53}$$

La reconstruction à un paramètre est choisie comme une fonction constante du rayon : $n_l(R) = \text{cte}$ (de Chaisemartin [2009]). Considérant que :

$$n_l^{(p)} = \int_{S_p}^{S_{p+1}} n_l(S)dS = \int_{R_p}^{R_{p+1}} n_l(R)dR \Rightarrow n_l(S)dS = n_l(R)dR \tag{2.54}$$

on obtient :

$$n_l(S) = n_l(R)\frac{dR}{dS} = n_l(R)\frac{d\left(\frac{S}{4\pi}\right)^{1/2}}{dS} = \frac{n_l(R)}{4\sqrt{\pi}}\frac{1}{\sqrt{S}} \tag{2.55}$$

Sachant que :

$$m_l^{(p)} = \int_{R_p}^{R_{p+1}} \rho_l \frac{4\pi R^3}{3} n_l(R)dR \tag{2.56}$$

on a :

$$n_l(R) = m_l^{(p)} \frac{48\pi}{\rho_l\left(S_{p+1}^2 - S_p^2\right)} = \text{cte} \tag{2.57}$$

Finalement :

$$n_l(S) = \frac{12\sqrt{\pi}}{\rho_l\left(S_{p+1}^2 - S_p^2\right)}\frac{m_l^{(p)}}{\sqrt{S}} \tag{2.58}$$

Les flux d'évaporation peuvent maintenant être explicités :

$$E^{(p)}(\Psi) = -\left[R_S m_p n_l(S)\{\Psi\}^S\right]_{S_p}^{S_{p+1}} + \int_{S_p}^{S_{p+1}} R_S n_l(S)\{\Psi\}^S \frac{\partial}{\partial S}(m_p)\,dS \tag{2.59}$$

$$= \frac{2S_{p+1}}{S_{p+2}^2 - S_{p+1}^2} R_S m_l^{(p+1)}\langle\Psi\rangle - \frac{2S_p}{S_{p+1}^2 - S_p^2} R_S m_l^{(p)}\langle\Psi\rangle - \frac{3}{S_{p+1}+S_p} R_S m_l^{(p)}\langle\Psi\rangle \tag{2.60}$$

$$\boxed{E^{(p)}(\Psi) = E_1^{(p+1)} m_l^{(p+1)}\langle\Psi\rangle - E_1^{(p)} m_l^{(p)}\langle\Psi\rangle - E_2^{(p)} m_l^{(p)}\langle\Psi\rangle} \tag{2.61}$$

où $E_1^{(p)} = 2R_S S_p/(S_{p+1}^2 - S_p^2)$ et $E_2^{(p)} = 3R_S/(S_{p+1}+S_p)$. Les termes $E_1^{(p)}$ représente les échanges de la quantité Ψ entre sections, alors que les termes $E_2^{(p)}$ représente l'échange avec le gaz.

Approches Multi-fluides d'ordre 2

On utilise deux moments pour reconstruire la fdp, ce qui augmente nettement la précision. Deux types de reconstruction existent dans la littérature : l'approche exponentielle de Dufour and Villedieu [2005] et l'approche linéaire de Laurent [2006]. L'approche exponentielle utilise la forme suivante :

$$n_l(S) = A.exp(-B.S) \tag{2.62}$$

et l'approche linéaire utilise celle-ci :

$$n_l(S) = A.S + B \tag{2.63}$$

Ces deux reconstructions font appel à deux paramètres (A et B), et nécessitent donc deux moments pour les fermer.

Pour la méthode exponentielle, les deux moments utilisés sont la densité de nombre de gouttes et la masse. La reconstruction doit donc vérifier :

$$n_l^{(p)} = \int_{S_p}^{S_{p+1}} A.exp(-B.S)dS \tag{2.64}$$

$$m_l^{(p)} = \int_{S_p}^{S_{p+1}} m_p.A.exp(-B.S)dS \tag{2.65}$$

On obtient un système non-linéaire à 2 équations et 2 inconnues (A et B), dont la résolution fait appel à des méthodes itératives très coûteuses en temps de calcul. Cependant la reconstruction exponentielle est définie positive, ce qui est un avantage considérable pour représenter des moments qui sont physiquement toujours positifs.

Pour la méthode linéaire, les deux moments utilisés sont la densité de nombre de gouttes et la surface. La reconstruction doit vérifier :

$$n_l^{(p)} = \int_{S_p}^{S_{p+1}} (A.S + B)\, dS \tag{2.66}$$

$$S_l^{(p)} = \int_{S_p}^{S_{p+1}} S.\,(A.S + B)\, dS \tag{2.67}$$

On obtient un système à 2 équations et 2 inconnues, qui peut être résolu de manière directe. L'inconvénient est que cette reconstruction n'est pas définie positive, et il faut prendre des précautions particulières pour que la méthode d'évaporation reste positive (Laurent [2006]).

Pour tenter de lever les limitations des méthodes d'ordre 2 existantes, une troisième reconstruction de second ordre est proposée ici :

$$n_l(S) = A(S + B)^2 \tag{2.68}$$

Cette reconstruction a l'avantage d'être définie positive, comme la méthode exponentielle. On utilise les mêmes moments que la reconstruction linéaire :

$$n_l^{(p)} = \int_{S_p}^{S_{p+1}} A(S+B)^2 dS = A\left[\frac{1}{3}\left(S_{p+1}^3 - S_p^3\right) + B\left(S_{p+1}^2 - S_p^2\right) + B^2\left(S_{p+1} - S_p\right)\right] \tag{2.69}$$

$$S_l^{(p)} = \int_{S_p}^{S_{p+1}} S.A(S+B)^2 dS = A\left[\frac{1}{4}\left(S_{p+1}^4 - S_p^4\right) + \frac{2B}{3}\left(S_{p+1}^3 - S_p^3\right) + \frac{B^2}{2}\left(S_{p+1}^2 - S_p^2\right)\right] \tag{2.70}$$

En définissant le rapport surface sur densité de nombre de gouttes :

$$\frac{S_l^{(p)}}{n_l^{(p)}} = \frac{\frac{1}{4}\left(S_{p+1}^4 - S_p^4\right) + \frac{2B}{3}\left(S_{p+1}^3 - S_p^3\right) + \frac{B^2}{2}\left(S_{p+1}^2 - S_p^2\right)}{\frac{1}{3}\left(S_{p+1}^3 - S_p^3\right) + B\left(S_{p+1}^2 - S_p^2\right) + B^2\left(S_{p+1} - S_p\right)} \tag{2.71}$$

on peut écrire l'équation du deuxième ordre permettant de trouver le paramètre B :

$$C_1.B^2 + C_2.B + C_3 = 0 \tag{2.72}$$

avec :

$$C_1 = \frac{S_l^{(p)}}{n_l^{(p)}}\left(S_{p+1} - S_p\right) - \frac{S_{p+1}^2 - S_p^2}{2} \tag{2.73}$$

$$C_2 = \frac{S_l^{(p)}}{n_l^{(p)}}\left(S_{p+1}^2 - S_p^2\right) - 2\frac{S_{p+1}^3 - S_p^3}{3} \tag{2.74}$$

$$C_3 = \frac{S_l^{(p)}}{n_l^{(p)}}\left(\frac{S_{p+1}^3 - S_p^3}{3}\right) - \frac{S_{p+1}^4 - S_p^4}{4} \tag{2.75}$$

Le paramètre est alors immédiatement calculable. L'équation quadratique Eq. 2.72 peut admettre 0, 1 ou 2 solutions. Dans le cas où elle n'a pas de solution, on bascule sur une reconstruction d'ordre 1. Si il y a une ou deux solutions, on impose à la reconstruction d'être monotone sur chaque section, ce qui laisse au maximum une seule solution (si aucune solution ne remplit ce critère on revient à l'ordre 1). L'avantage de cette reconstruction est qu'elle est positive comme la méthode exponentielle, et que les paramètres sont calculés de manière directe comme la méthode linéaire. Cependant quelques inconvénients demeurent : cette méthode n'est pas une perturbation de l'ordre 1 (annuler B ne suffit pas pour revenir à l'ordre 1, alors que c'est le cas pour les méthodes linéaires et exponentielles), et n'est pas bijective (un couple de moments peut conduire à deux reconstructions différentes, sans le critère de monotonicité par section).

2.2.4 Système d'équations final

Dans le cadre des calculs effectués ici avec AVBP , on utilisera uniquement la méthode multi-fluide d'ordre 1 (même si d'autres méthodes intégrées dans d'autres codes seront utilisées pour les comparaisons sur cas tests canoniques). Le système final d'équations en résultant est le suivant :

$$\frac{\partial}{\partial t} m_l^{(p)} + \frac{\partial}{\partial x_m} m_l^{(p)} u_{l,m}^{(p)} = -\left(E_1^{(p)} + E_2^{(p)}\right) m_l^{(p)} + E_1^{(p+1)} m_l^{(p+1)} \tag{2.76}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} m_l^{(p)} u_{l,i}^{(p)} + \frac{\partial}{\partial x_m} m_l^{(p)} u_{l,i}^{(p)} u_{l,m}^{(p)} &= -\left(E_1^{(p)} + E_2^{(p)}\right) m_l^{(p)} u_{l,i}^{(p)} + E_1^{(p+1)} m_l^{(p+1)} u_{l,i}^{(p+1)} \\ &\quad - m_l^{(p)} \frac{u_{l,i}^{(p)} - u_{g@l}}{\tau_p^{(p)}} - \frac{\partial}{\partial x_m} m_l^{(p)} \delta R_{l,im}^{(p)} \end{aligned} \tag{2.77}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} m_l^{(p)} \delta\Theta_l^{(p)} + \frac{\partial}{\partial x_m} m_l^{(p)} \delta\Theta_l^{(p)} u_{l,m}^{(p)} &= -\left(E_1^{(p)} + E_2^{(p)}\right) m_l^{(p)} \delta\Theta_l^{(p)} + E_1^{(p+1)} m_l^{(p+1)} \delta\Theta_l^{(p+1)} \\ &\quad - \frac{2 m_l^{(p)} \delta\Theta_l^{(p)}}{\tau_p^{(p)}} - m_l^{(p)} \delta R_{p,im}^{(p)} \frac{\partial U_{l,i}^{(p)}}{\partial x_m} - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_m} m_l^{(p)} \delta S_{p,iim} \end{aligned} \tag{2.78}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} m_l^{(p)} H_l^{(p)} + \frac{\partial}{\partial x_m} m_l^{(p)} H_l^{(p)} u_{l,m}^{(p)} &= -\left(E_1^{(p)} + E_2^{(p)}\right) m_l^{(p)} H_l^{(p)} + E_1^{(p+1)} m_l^{(p+1)} H_l^{(p+1)} \\ &\quad + m_l^{(p)} C_{p,l} E_T^{(p)} \end{aligned} \tag{2.79}$$

2.3 Simulation aux Grandes Echelles

Les systèmes d'équations détaillés précédemment sont applicables à une approche de type DNS (Direct Numerical Simulation), au sens où toutes les échelles des phases gazeuse et liquide sont simulées. Le calcul de toutes ces échelles est concevable pour des applications simples et/ou à faible Reynolds, où les échelles minimales et l'étendue du spectre sont faibles. Pour des calculs plus complexes, avec de grandes disparités d'échelles, on ne peut résoudre tout le spectre. On utilise donc pour cela la Simulation aux Grandes Echelles (SGE), qui permet de s'affranchir de la résolution complète des plus petites échelles de l'écoulement.

La base de la SGE est le filtrage des équations DNS. Le filtre permet de définir des équations qui sont des moyennes spatiales. On applique aux quantités transportées un filtre spatial conditionné par la masse (moyenne de Favre) ou un filtre spatial non conditionné (moyenne de Reynolds) :

$$\bar{m}_\Phi \widehat{f_\Phi}(\vec{x}) = \int_{\Delta_f} m_\Phi f_\Phi(\vec{x}) G_{\Delta_f}(\vec{x} - \vec{x}') d\vec{x}' \tag{2.80}$$

$$\bar{f}_\Phi(\vec{x}) = \int_{\Delta_f} f_\Phi(\vec{x}) G_{\Delta_f}(\vec{x} - \vec{x}') d\vec{x}' \tag{2.81}$$

où Φ est la phase considérée (l pour liquide, g pour gaz), Δ_f la taille du filtre et G_{Δ_f} l'opérateur du filtre. Du point de vue spectral, ce filtrage impose une fréquence de coupure sur la physique qui sera résolue

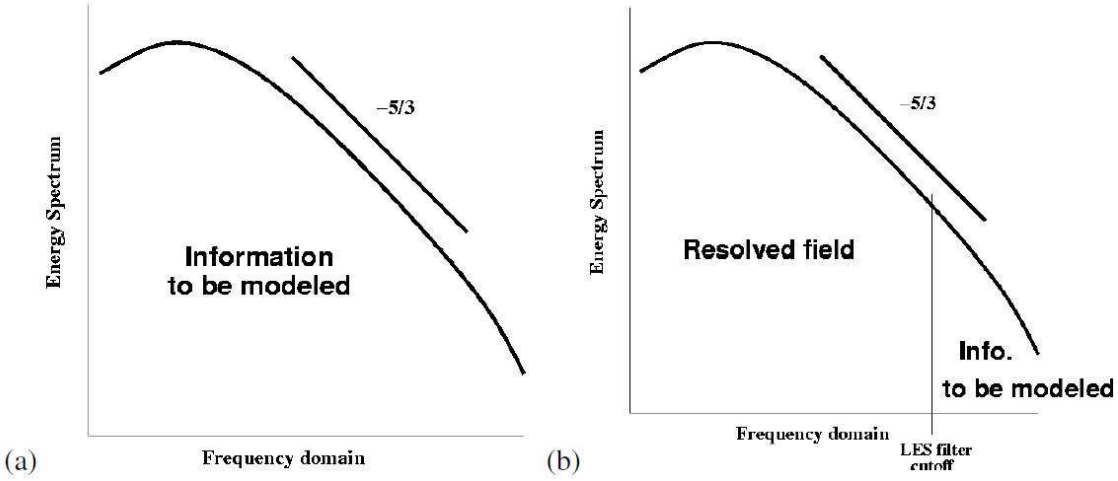


FIGURE 2.1 – Répresentation de l'effort de modélisation en RANS (a) et en LES (b) sur un spectre d'énergie en fonction de la fréquence.

(figure 2.1). Deux différences fondamentales ressortent de ce filtrage, en comparaison à la méthode RANS : la méthode LES modélise une plus faible partie du spectre turbulent, et elle ne fait pas de moyenne en temps (pas de filtrage sur un ensemble de réalisations).

2.3.1 Equations filtrées du FEM

L'extension à la SGE du FEM a été étudiée par Moreau [2006], Moreau et al. [2010], Riber et al. [2006] et Riber [2007]. Le système d'équation résultant du filtrage spatial est le suivant :

$$\frac{\partial}{\partial t}\overline{n}_l + \frac{\partial}{\partial x_m}\overline{n}_l\widehat{u}_{l,m} = 0 \tag{2.82}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\overline{m}_l + \frac{\partial}{\partial x_m}\overline{m}_l\widehat{u}_{l,m} = \dot{m}_{evap} \tag{2.83}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\overline{m}_l\widehat{u}_{l,i} + \frac{\partial}{\partial x_m}\overline{m}_l\widehat{u}_{l,i}\widehat{u}_{l,m} = \dot{m}_{evap}\widehat{u}_{l,i} - \overline{m}_l\frac{\widehat{u}_{l,i}-\widehat{u}_{g,i}}{\tau_p} - \frac{\partial}{\partial x_m}m_l\widehat{\delta R}_{l,im} - \frac{\partial}{\partial x_m}T_{l,im} \tag{2.84}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\overline{m}_l\delta\widehat{\Theta}_l + \frac{\partial}{\partial x_m}\overline{m}_l\delta\widehat{\Theta}_l\widehat{u}_{l,m} = \dot{m}_{evap}\delta\widehat{\Theta}_l - 2\frac{\overline{m}_l}{\tau_p}\delta\widehat{\Theta}_l - \overline{m}_l\widehat{\delta R}_{p,im}\frac{\partial\widehat{u}_{l,i}}{\partial x_m} - \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x_m}\overline{m}_l\widehat{\delta S}_{p,iim} - \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x_m}Q_{p,m} + \Pi_{\delta\Theta_l} \tag{2.85}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\overline{m}_l\widehat{H}_l + \frac{\partial}{\partial x_m}\overline{m}_l\widehat{H}_l\widehat{u}_{l,m} = \dot{m}_{evap}\widehat{H}_l + \overline{m}_l C_{p,l}\widehat{E}_T \tag{2.86}$$

On considère que les fermetures proposées pour les termes décorrélés filtrés dans le FEM classique

restent valables pour le FEM en LES. Il reste donc à modéliser 3 termes :

$$T_{l,ij} = \overline{m}_l \left(\widehat{u_{l,i} u_{l,j}} - \widehat{u}_{l,i} \widehat{u}_{l,j} \right) \tag{2.87}$$

$$\Pi_{\delta\Theta_l} = \overline{m}_l \left(\widehat{\delta R_{p,im} \frac{\partial u_{l,i}}{\partial x_m}} - \widehat{\delta R}_{p,im} \frac{\partial \widehat{u}_{l,i}}{\partial x_m} \right) \tag{2.88}$$

$$Q_{l,j} = \overline{m}_l \left(\widehat{u_{l,i} \delta\Theta_l} - \widehat{u}_{l,i} \widehat{\delta\Theta_l} \right) \tag{2.89}$$

Moreau [2006], Moreau et al. [2010] ont proposé un modèle pour $T_{l,ij}$ basé sur le modèle de Smagorinsky compressible (Smagorinsky [1963]) et le modèle de Yoshizawa (Yoshizawa [1986]) :

$$T_{l,ij} = -C_s^2 \Delta_f^2 \overline{m}_l |\hat{S}_l| \left(\hat{S}_{l,ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} \hat{S}_{l,kk} \right) + C_l^2 \Delta_f^2 \overline{m}_l |\hat{S}_l|^2 \delta_{ij} \tag{2.90}$$

où $S_{l,ij} = \frac{\partial u_{l,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_{l,j}}{\partial x_i}$ est le tenseur de cisaillement. Le terme $Q_{p,j}$ de diffusion du mouvement décorrélé n'est pas modélisé (Moreau [2006], Riber [2007]). Et le terme de production de sous-maille de RUE filtré $\Pi_{\delta\Theta_l}$ est modélisé en considérant que toute l'énergie de sous-maille produite par le mouvement corrélé est intégralement transférée en énergie décorrélée :

$$\Pi_{\delta\Theta_l} \approx -T_{l,ij} \frac{\partial}{\partial x_j} \widehat{u}_{l,i} \tag{2.91}$$

2.3.2 Equations filtrées du FEMM

Etant donné que le filtrage LES agit sur l'espace physique, et que le FEM et le FEMM sont identiques du point de vue de l'espace physique, on utilisera les mêmes méthodes de filtrage pour le FEMM en LES :

$$\frac{\partial}{\partial t} \overline{m}_l^{(p)} + \frac{\partial}{\partial x_m} \overline{m}_l^{(p)} \widehat{u}_{l,m}^{(p)} = -\left(E_1^{(p)} + E_2^{(p)} \right) \overline{m}_l^{(p)} + E_1^{(p+1)} \overline{m}_l^{(p+1)} \tag{2.92}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \overline{m}_l^{(p)} \widehat{u}_{l,i}^{(p)} + \frac{\partial}{\partial x_m} \overline{m}_l^{(p)} \widehat{u}_{l,i}^{(p)} \widehat{u}_{l,m}^{(p)} &= -\left(E_1^{(p)} + E_2^{(p)} \right) \overline{m}_l^{(p)} \widehat{u}_{l,i}^{(p)} + E_1^{(p+1)} \overline{m}_l^{(p+1)} \widehat{u}_{l,i}^{(p+1)} \\ &\quad - \overline{m}_l^{(p)} \frac{\widehat{u}_{l,i}^{(p)} - \widehat{u}_{g@l}}{\tau_p^{(p)}} - \frac{\partial}{\partial x_m} \overline{m}_l^{(p)} \delta \widehat{R}_{l,im}^{(p)} - \frac{\partial}{\partial x_m} T_{l,im}^{(p)} \end{aligned} \tag{2.93}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \overline{m}_l^{(p)} \widehat{\delta\Theta}_l^{(p)} + \frac{\partial}{\partial x_m} \overline{m}_l^{(p)} \widehat{\delta\Theta}_l^{(p)} \widehat{u}_{l,m}^{(p)} &= -\left(E_1^{(p)} + E_2^{(p)} \right) \overline{m}_l^{(p)} \widehat{\delta\Theta}_l^{(p)} + E_1^{(p+1)} \overline{m}_l^{(p+1)} \widehat{\delta\Theta}_l^{(p+1)} \\ &\quad - \frac{2 \overline{m}_l^{(p)} \widehat{\delta\Theta}_l^{(p)}}{\tau_p^{(p)}} - \overline{m}_l^{(p)} \delta \widehat{R}_{p,im}^{(p)} \frac{\partial U_{l,i}^{(p)}}{\partial x_m} - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_m} \overline{m}_l^{(p)} \widehat{\delta S}_{p,iim}^{(p)} \\ &\quad - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_m} \widehat{Q}_{p,m}^{(p)} + \Pi_{\delta\Theta_l}^{(p)} \end{aligned} \tag{2.94}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \overline{m}_l^{(p)} \widehat{H}_l^{(p)} + \frac{\partial}{\partial x_m} \overline{m}_l^{(p)} \widehat{H}_l^{(p)} \widehat{u}_{l,m}^{(p)} &= -\left(E_1^{(p)} + E_2^{(p)} \right) \overline{m}_l^{(p)} \widehat{H}_l^{(p)} + E_1^{(p+1)} \overline{m}_l^{(p+1)} \widehat{H}_l^{(p+1)} \\ &\quad + \overline{m}_l^{(p)} C_{p,l} E_T^{(p)} \end{aligned} \tag{2.95}$$

Comme pour le FEM en LES, les termes de sous-maille sont :

$$T_{l,ij}^{(p)} = \overline{m}_l^{(p)} \left(\widehat{u_{l,i}^{(p)} u_{l,j}^{(p)}} - \widehat{u_{l,i}}^{(p)} \widehat{u}_{l,j}^{(p)} \right) \tag{2.96}$$

$$\Pi_{\delta\Theta_l}^{(p)} = \overline{m}_l^{(p)} \left(\widehat{\delta R_{p,im}^{(p)} \frac{\partial u_{l,i}^{(p)}}{\partial x_m}} - \widehat{\delta R}_{p,im}^{(p)} \frac{\partial \widehat{u}_{l,i}^{(p)}}{\partial x_m} \right) \tag{2.97}$$

$$Q_{l,j}^{(p)} = \overline{m}_l^{(p)} \left(\widehat{u_{l,i}^{(p)} \delta\Theta_l} - \widehat{u}_{l,i}^{(p)} \widehat{\delta\Theta_l}^{(p)} \right) \tag{2.98}$$

et sont modélisés comme précédemment :

$$\begin{aligned} T_{l,ij}^{(p)} &= -C_s^2 \Delta_f^2 \overline{m}_l^{(p)} |\hat{S}_l^{(p)}| \left(\hat{S}_{l,ij}^{(p)} - \frac{\delta_{ij}}{3} \hat{S}_{l,kk}^{(p)} \right) + C_l^2 \Delta_f^2 \overline{m}_l^{(p)} |\hat{S}_l^{(p)}|^2 \delta_{ij} \\ &= -\nu_{TURB,tpf}^{(p)} \left(\hat{S}_{l,ij}^{(p)} - \frac{\delta_{ij}}{3} \hat{S}_{l,kk}^{(p)} \right) + P_{TURB,tpf}^{(p)} \delta_{ij} \end{aligned} \tag{2.99}$$

$$\Pi_{\delta\Theta_l}^{(p)} = -T_{l,ij}^{(p)} \frac{\partial}{\partial x_j} \widehat{u}_{l,i}^{(p)} \tag{2.100}$$

$$Q_{l,j}^{(p)} = 0 \tag{2.101}$$

avec où $S_{l,ij}^{(p)} = \frac{\partial u_{l,i}^{(p)}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_{l,j}^{(p)}}{\partial x_i}$

2.3.3 Equations filtrées de la phase gazeuse

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_g + \frac{\partial}{\partial x_m} \rho_g \widehat{u}_{g,m} = S_{m_l} \tag{2.102}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_g \widehat{u}_{g,i} + \frac{\partial}{\partial x_m} \rho_g \widehat{u}_{g,i} \widehat{u}_{g,m} = -\frac{\partial \widehat{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_m} \rho_g \nu_g \widehat{D}_{g,im} + \frac{\partial}{\partial x_m} T_{g,ij} + S_{m_l u_{l,i}} \tag{2.103}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_g \widehat{E}_g + \frac{\partial}{\partial x_m} (\rho_g \widehat{E}_g + \widehat{P}) \widehat{u}_{g,m} = -\frac{\partial}{\partial x_m} \rho_g \nu_g \widehat{D}_{g,im} \widehat{u}_{g,i} + \frac{\partial}{\partial x_m} \overline{Q}_{g,ij} + S_{m_l E_g} \tag{2.104}$$

où ρ_g, $u_{g,i}$ et E_g sont la densité, la vitesse et l'énergie totale non chimique du gaz. La viscosité du tenseur terme de sous-maille $T_{g,ij} = 2\nu_t \overline{S}_{ij}$ est modélisé avec le modèle WALE de Nicoud and Ducros [1999] :

$$\nu_t = (C_w \Delta_f)^2 \frac{\left(S_{ij}^d S_{ij}^d \right)^{3/2}}{\left(\overline{S}_{ij} \overline{S}_{ij} \right)^{5/2} + \left(S_{ij}^d S_{ij}^d \right)^{5/4}} \tag{2.105}$$

avec :

$$S_{ij}^d = \frac{1}{2} \left(\overline{g}_{ij}^2 + \overline{g}_{ij}^2 \right) - \frac{1}{2} \overline{g}_{kk}^2 \tag{2.106}$$

$$\overline{g}_{ij}^2 = \overline{g}_{ik} \overline{g}_{kj} \tag{2.107}$$

$$\overline{g}_{ij} = \frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j} \tag{2.108}$$

C_w est ici fixée à 0.4929.

Les termes S_Φ sont les termes sources venant du liquide. Pour le FEM, ces termes sources sont :

$$S_{m_l} = -\dot{m}_p \tag{2.109}$$

$$S_{m_l u_{l,i}} = -\dot{m}_p \widehat{u}_{l,i} + \overline{m}_l \frac{\widehat{u}_{l,i} - \widehat{u}_{g,i}}{\tau_p} \tag{2.110}$$

$$S_{m_l E_g} = -\dot{m}_p \widehat{H}_l - \overline{m}_l C_{p,l} \widehat{E}_T + \frac{\overline{m}_l}{\overline{\tau}_p} \left(\widehat{u}_{l,i} - \widehat{u}_{g,i}\right) \widehat{u}_{g,i} \tag{2.111}$$

Pour le FEMM, les termes sources sont :

$$S_{m_l} = \sum_{p=1}^{N} E_2^{(p)} \overline{m}_l^{(p)} \tag{2.112}$$

$$S_{m_l u_{l,i}} = \sum_{p=1}^{N} \left(\frac{\overline{m}_l^{(p)}}{\overline{\tau}_p^{(p)}} \left(\widehat{u}_{l,i}^{(p)} - \widehat{u}_{g,i} \right) + E_2^{(p)} \overline{m}_l^{(p)} \widehat{u}_{l,i}^{(p)} \right) \tag{2.113}$$

$$S_{m_l E_g} = + \sum_{p=1}^{N} \left(E_2^{(p)} \overline{m}_l^{(p)} \widehat{u}_{g,i} \widehat{u}_{l,i}^{(p)} - \overline{m}_l^{(p)} C_{p,l} E_T^{(p)} + \frac{\overline{m}_l^{(p)}}{\overline{\tau}_p^{(p)}} \left(\widehat{u}_{l,i}^{(p)} - \widehat{u}_{g,i} \right) \widehat{u}_{g,i} \right) \tag{2.114}$$

2.4 Discussion générale sur les approches utilisées

2.4.1 Prise en compte du two-way coupling

L'influence d'une phase dispersée sur la phase gazeuse a souvent été étudiée sur des cas de Turbulence Homogène Isotrope. Elgobashi and Truesdell [1993], et plus récemment Ferrante and Elghobashi [2003], observent l'effet de la force de traînée d'une phase dispersée sur l'écoulement gazeux. Ils montrent une différence de comportement en fonction du nombre de Stokes. La figure 2.2 montre le spectre d'énergie du champ gazeux en THI, pour différentes caractéristiques de la phase dispersée.

Les particules à nombre de Stokes faible ($<< 1$, cas B) se comportent comme des traceurs. Elles sont piégées par les petites échelles (nombres d'onde élevés). Cependant, en raison de leur forte densité, elles modifient la rhéologie du gaz à ces petites échelles en augmentant la densité effective (comportement de "gaz lourd" (Saffmann [1962])). Cette augmentation conduit à une plus forte dissipation et donc une réduction accélérée de l'énergie des grandes échelles.

Les particules à nombre de Stokes élevé($>> 1$, cas E) n'interagissent pas avec les petites échelles, en raison de la différence des temps caractéristiques. Cependant la force de traînée induite est à l'origine d'un effort contra-rotatif par rapport au sens des tourbillons (figure 2.3, Ferrante and Elghobashi [2003]) qui conduit à une diminution de leur intensité. Les résultats de Ferrante and Elghobashi [2003] montrent que cet effet de "puits" d'énergie se retrouve principalement aux grandes échelles. Les particules à grand nombre de Stokes interagissent donc avec les grandes échelles de la turbulence.

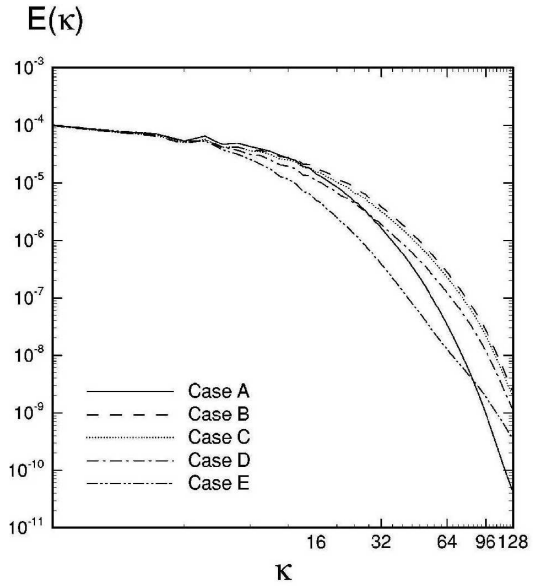


FIGURE 2.2 – Spectre d'énergie de la phase gazeuse pour une THI avec phase dispersée à différents nombre de Stokes (Ferrante and Elghobashi [2003]) : sans particules (A), avec particules à nombre de Stokes 0.1 (B), 0.25 (C), 1.0 (D), et 5.0 (E).

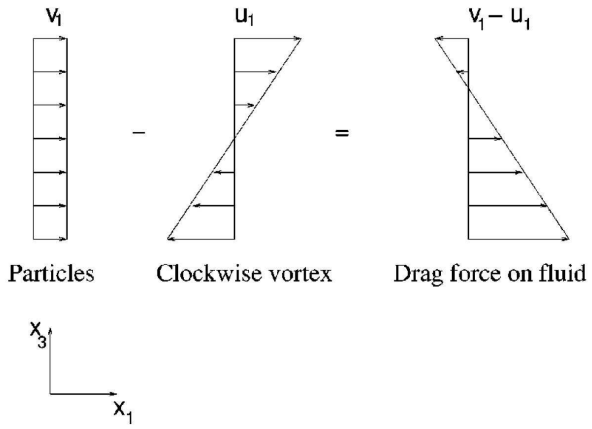


FIGURE 2.3 – Principe de l'effort contra-rotatif exercé par une phase dispersée à fort nombre de Stokes sur une structure tourbillonnaire.

Les particules à nombre de Stokes critique (≈ 1, cas D) ont un comportement intermédiaire par rapport aux deux cas précédents. En effet, elles ont suffisamment de temps pour interagir avec les petites échelles, en augmentant l'énergie de ces dernières et donc la dissipation. Elles agissent aussi sur les grandes échelles, en raison de l'effort contra-rotatif évoqué précédemment. Les particules interagissent donc avec tout le spectre de la turbulence. Elles sont qualifiées de critique parce qu'elles maximisent l'ef-

fet de concentration préférentielle de la phase dispersée (forte variation de la concentration de gouttes).

Quand on résout toutes les échelles de la turbulence, la question de savoir comment agissent les particules sur la phase gazeuse ne pose de problème particulier, si on "oublie" le problème du conditionnement qui est développé dans la suite. Les interactions entre la phase dispersée et la phase gazeuse se font à toutes les échelles, puisqu'elles sont toutes résolues.

Dans le cadre de calculs LES, la question est plus compliquée. En effet, les petites échelles de la turbulence ne sont pas résolues, et on doit se demander comment appliquer le forçage par traînée. Comme l'analyse de Ferrante and Elghobashi [2003] le montre, les comportements du forçage étant différents selon le nombre de Stokes, une procédure de distribution en fonction du Stokes semble nécessaire.

A faible nombre de Stokes, le transfert direct d'énergie est faible, les particules étant en équilibre avec le gaz. Cependant les particules agissent sur les petites échelles, en augmentant la densité effective du gaz. L'effet du forçage devra donc apparaître dans un terme de sous-maille pour la phase gazeuse, de manière à augmenter la dissipation d'énergie.

A nombre de Stokes critique, les particules interagissent avec tout le spectre de la turbulence. On doit donc prendre en compte l'effet de la traînée sur la quantité de mouvement résolue du gaz, mais aussi sur le mouvement de sous-maille. Ici les particules augmentent l'énergie des petites échelles. La LES introduit un autre nombre de Stokes, associé à l'échelle de coupure. Ce nombre compare le temps de relaxation des particules avec celui de la plus petite échelle résolue de la LES. Si ce nombre est fort, le forçage est effectif sur le mouvement résolu et sur le mouvement de sous-maille. Si ce nombre est faible, seul l'effet sur le mouvement de sous-maille subsiste et sera mixte, à savoir une augmentation de l'énergie des plus petites échelles, et une diminution de l'énergie en s'approchant de l'échelle de coupure. La modélisation de sous-maille devra représenter ces deux effets.

A fort nombre de Stokes, les particules interagissent seulement avec le mouvement de grandes échelles, qui est le mouvement résolu en LES. La modélisation ne fait donc intervenir que des échanges entre le mouvement moyen des phases dispersée et gazeuse.

Les calculs LES effectués dans le cadre de cette thèse, comme dans les travaux précédents (Riber [2007], Lamarque [2007], Vié and Habchi [2008], Martinez et al. [2009], Martinez [2010], Sanjosé [2009], Jaegle [2009], Vié et al. [2010b]), n'incluent qu'un forçage sur les grandes échelles. Cette simplification de la physique réelle conduit à une modification de la distribution locale d'énergie. La question est donc de savoir qu'elle est l'impact et l'importance d'une telle simplification, et nécessiterait une étude plus approfondie, mais ne fait pas partie des objectifs de cette thèse.

2.4.2 Problème du conditionnement

Le deuxième point lié au two-way coupling est le problème du conditionnement. La fdp de départ qui permet d'écrire le FEM représente la statistique d'un ensemble de réalisations de la phase dispersée,

conditionnée par une seule réalisation de la phase gazeuse.

Dans l'hypothèse d'une phase dispersée à très faible fraction massique et donc d'un couplage "one-way", cette hypothèse est valide. Mais, dans le cas d'un "two-way coupling", chaque réalisation de la phase dispersée modifie différemment la phase gazeuse, et donc le conditionnement par une réalisation unique de la phase gazeuse n'est plus valide.

Février et al. [2005] suggère qu'une approche de type FEM pour les écoulements fortement chargés est cependant possible si le temps de réponse des particules est du même ordre que celui des grandes échelles de la phase gazeuse. En effet, il est alors possible de tirer avantage du filtrage LES de la phase gazeuse, en conditionnant les statistiques de la phase dispersée non pas sur une réalisation du gaz mais sur une réalisation du gaz filtrée. Comme expliqué à la section précédente, pour de faibles nombres de Stokes, les particules ne modifient pas le champ filtré du gaz, et le conditionnement par une seule phase gazeuse reste donc valide. Une telle approche ne fait cependant plus appel à l'EWB mais une équation de type Fokker-Planck, qui prend en compte l'effet de la turbulence du gaz non-résolue sur l'équation d'évolution de la fdp (voir Reeks [1991] notamment).

2.4.3 Validité des fermetures des flux décorrélés

Les fermetures de type viscosité pour le tenseur de second ordre de l'équation de quantité de mouvement ont été déjà validées a priori (Moreau [2006]) et a posteriori (Vié et al. [2009], annexe C) sur des cas tests de turbulence homogène isotrope chargée en particules. Cependant, Riber [2007] avait déjà observé sur le cas de canal de Hishida et al. [1987] que de telles fermetures pouvaient être mal adaptées pour les écoulements cisaillés, comme montré également par Reeks [2005]. Les travaux de Masi [2010], Masi et al. [2010] confirment cette tendance. Dans ces travaux, une couche de fluide est chargée en particules et déposée dans une turbulence homogène isotrope (figure 2.4).

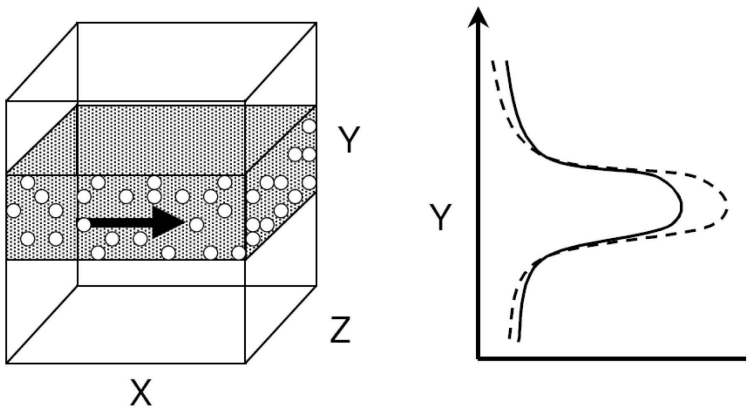


FIGURE 2.4 – Cas test de Masi et al. [2010].

L'objectif de Masi et al. [2010] est d'établir des corrélations pour l'évaluation du tenseur de second

ordre, et de les comparer à des calculs de référence lagrangiens. La figure 2.5 compare les niveaux de dissipation moyenne au travers de la nappe de particules, et la figure 2.6 compare la fdp de dissipation locale à la périphérie de la couche, dans la zone de cisaillement.

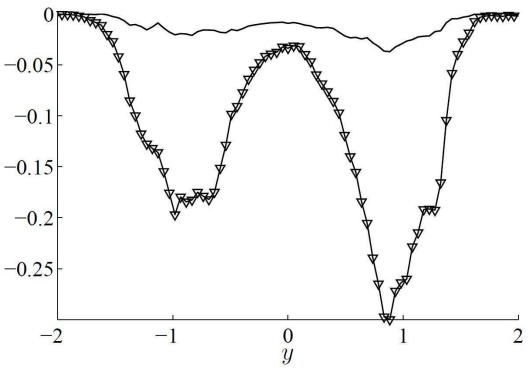


FIGURE 2.5 – Profil exact (ligne continue) et profil modélisé (triangles) de dissipation moyenne à $St \approx 1$ (Masi et al. [2010]).

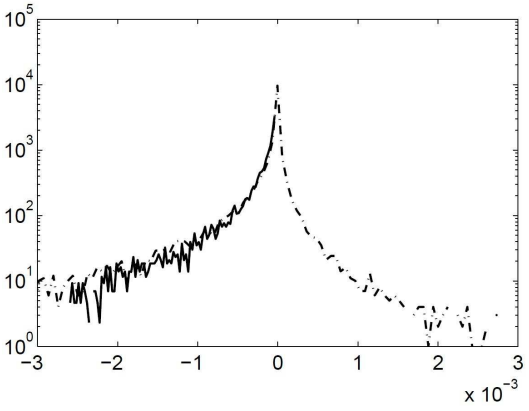


FIGURE 2.6 – Fdp exacte (ligne discontinue) et fdp modélisé (ligne continue) de dissipation locale à $St \approx 1$ (Masi et al. [2010]).

Deux points importants sont à noter : la dissipation moyenne est largement surestimée en tout point de la nappe, et les zones de dissipation locale négative ne sont pas modélisées. En effet, la figure 2.6 montre que le tenseur de second ordre a aussi un effet anti-diffusif correspondant à un échange du mouvement décorrélé vers le mouvement moyen, ce qui n'est pas reproductible avec le modèle à viscosité utilisé ici. Le travail de Masi [2010] a donc consisté à définir de nouvelles fermetures en prenant en compte d'autres paramètres pour le calcul de la viscosité effective, comme les invariants du tenseur de cisaillement. Elle a proposé ainsi des fermetures permettant de revenir à des niveaux de dissipation moyenne raisonnable, et permettant de résoudre les échanges mouvement moyen - mouvement décorrélé dans les deux sens. Ces travaux nécessiteront certainement d'être intégrés au modèle FEM dans AVBP , même si le traitement de termes anti-diffusifs est un problème délicat.

2.4.4 Flux décorrélé pour les moments en taille des particules dans les approches polydisperses

Dans le FEMM, on a considéré que la vitesse moyenne $U_{l,i}(x,t,S)$ est constante dans chaque section. Cependant, elle ne l'est pas nécessairement. Il faudrait donc prendre en compte dans le calcul de la vitesse moyenne une distribution de vitesse en fonction de la taille :

$$U_{l,i}^{(p)} = \frac{1}{m_l^{(p)}} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}^+} \int_{S_p}^{S_{p+1}} \frac{\rho_l S^{3/2}}{6\sqrt{\pi}} c_{p,i} f_p d\vec{c}_p dT dS = \frac{1}{m_l^{(p)}} \int_{S_p}^{S_{p+1}} \frac{\rho_l S^{3/2}}{6\sqrt{\pi}} U_{l,i}(x,t,s) n(S) dS \qquad (2.115)$$

En pratique, cela reviendrait à faire apparaître dans chaque équation un terme correctif supplémentaire. Ce terme correctif correspond à la convection de chaque moment avec une vitesse résiduelle supplémentaire $\delta U^{(p)}(\vec{x},t,S)$:

$$\delta U^{(p)}(\vec{x},t,S) = U_{l,i}(\vec{x},t,S) - U_{l,i}^{(p)}(\vec{x},t) \tag{2.116}$$

Cependant, la définition de ce terme convectif supplémentaire nécessite de présumer la forme de cette vitesse résiduelle, et n'est pas évidente. De plus, le même problème apparaît sur la définition de la vitesse décorrélée $\delta c_{p,i}(\vec{x},t,S)$ qui doit aussi dépendre de la taille. On a donc choisi dans ce travail de se limiter à une approche à une vitesse corrélée et une vitesse décorrélée par section.

Deuxième partie

Évaluation du FEMM sur des configurations simples

Introduction

L'objectif de cette partie est de réaliser une première évaluation du FEMM, et des méthodologies numériques qui lui sont associées dans AVBP .

Les méthodologies numériques disponibles dans AVBP pour la phase liquide sont présentées. Ces stratégies sont celles utilisées pour la phase gazeuse, mais ont été adaptées à la phase liquide par Riber [2007] et Martinez [2010] notamment. Une évaluation est proposée sur des cas tests simples de convection monodimensionnels.

Les deux composantes du FEMM sont ensuite évaluées séparément : la modélisation FEM pour reproduire la dynamique des écoulements turbulents , et l'approche multi-fluide qui agit sur la répartition et l'évaporation des gouttes. La modélisation FEM est évaluée sur un cas test de Turbulence Homogène Isotrope chargée en particules.

La prise en compte de la polydispersion est quant à elle évaluée sur le jet en écoulement transverse, dont la dynamique est fortement conditionnée par le nombre de Stokes des gouttes constituant le jet, et sur des cas tests d'évaporation 0D, permettant de mettre en évidence les caractéristiques physiques et numériques de la prise en compte de l'évaporation par l'approche multi-fluide.

Chapitre 3

Évaluation des stratégies numériques pour le calcul diphasique

3.1 Le code AVBP

AVBP est un code de calcul développé conjointement par le CERFACS [1] et IFP énergies nouvelles [2]. Ce code a été développé dans le but de disposer d'un solveur LES parallèle haute performance pour le calcul de géométries industrielles. Il est capable de résoudre les équations de Navier-Stokes sur des maillages non-structurés et hybrides et donc de simuler des écoulements complexes dans des géométries réelles. Destiné tout d'abord aux écoulements externes stationnaires non-réactifs, il a évolué pour répondre aux besoins accrus de simulation d'écoulements internes instationnaires diphasiques réactifs. Une évaluation détaillée des méthodes numériques utilisées dans AVBP ainsi que leur intérêt dans une approche LES sont proposés par Lamarque [2007].

L'intégration temporelle est explicite pour tous les schémas numériques d'AVBP . Tous les schémas convectifs ont une condition de stabilité de type Courant-Friedrichs-Levy (CFL) basée sur les ondes les plus rapides de l'écoulement, c'est-à-dire acoustiques en compressible :

$$\Delta t < \mathrm{CFL}\frac{\min(\Delta x)}{\max|\mathbf{u}|+c} \tag{3.1}$$

où c est la vitesse du son. La valeur du CFL maximum dépend du type de schéma utilisé. Une limite sur les pas de temps chimique et diffusif est également introduite dans le cas de simulations réactives multi-espèces.

Pour l'intégration des termes spatiaux, la méthode *cell-vertex* est utilisée. Elle consiste à stocker les variables conservatives aux nœuds et à résoudre les équations de conservation à la cellule de maillage. L'intérêt de cette méthode est une compacité maximale et une écriture facilement parallélisable.

1. Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée au Calcul Scientifique - www.cerfacs.fr
2. www.ifpenergiesnouvelles.fr

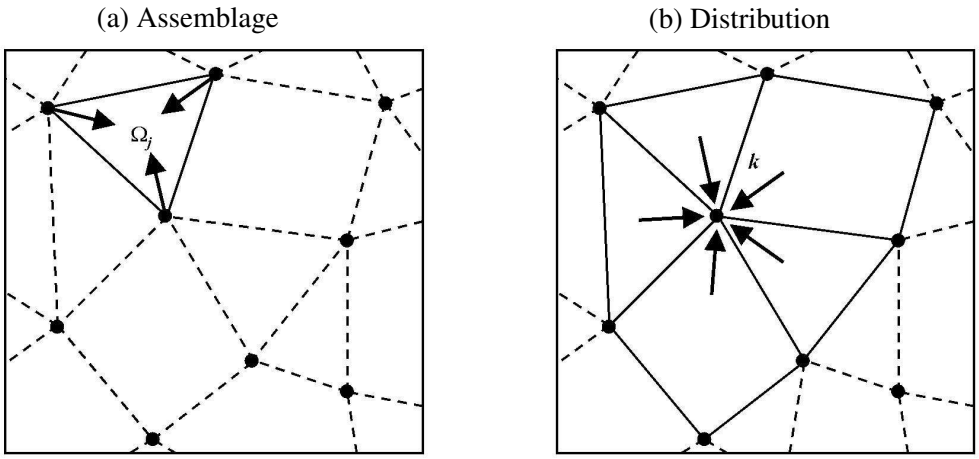


FIGURE 3.1 – Principe de la méthode cell-vertex, en deux étapes : assemblage et distribution. D'après Moureau [2004] .

Cette méthode consiste en deux étapes illustrées par la figure (3.1) :

– assemblage (ou gather) : les variables conservatives stockées aux nœuds sont stockées à la cellule en utilisant la connectivité cellule-nœuds.
– distribution (ou scatter) : les résidus calculés sur le volume de contrôle de la cellule sont redistribués aux volumes de contrôle centrés aux nœuds.

La méthode cell-vertex permet d'écrire facilement des opérateurs du premier et du second ordre pour des maillages non-structurés. L'opérateur du premier ordre est obtenu en calculant un gradient à la cellule après la phase d'assemblage, et la distribution est ensuite effectuée en faisant une moyenne volumique. Pour obtenir l'opérateur du second ordre, il suffit de remplacer la moyenne volumique de l'opérateur du premier ordre par une intégration surfacique sur le bord du volume de contrôle au nœud. Les défauts de cette méthode sont le temps de calcul pour les diverses opérations gather-scatter ainsi que la non-dissipation d'erreur numérique haute fréquence. Dès lors cette méthode implique l'utilisation de termes de diffusion artificielle appelée viscosité artificielle pour stabiliser les calculs.

3.2 Schémas numériques

Les schémas numériques dans AVBP sont nombreux, et sont adaptés aux maillages non-structurés et aux contraintes d'un calcul LES. En effet les maillages non-structurés sont gérés par une table de connectivité, qui limite fortement la longueur de stencil des schémas pour des raisons de coût. Pour les écoulements diphasiques, deux schémas sont utilisés. Le schéma TTGC développé par Colin and Rudgyard [2000] pour les calculs LES gazeux a été directement appliqué à la phase dispersée. Le schéma PSI a été intégré plus tard dans AVBP par Lamarque [2007], afin de remédier à un certain manque de

robustesse de TTGC. Il est associé à un schéma Lax-Wendroff pour la phase gazeuse.

3.2.1 Le schéma TTGC

Le schéma TTGC (Two-Step Taylor Galerkin Colin, Colin and Rudgyard [2000]) est un schéma centré spatio-temporel de type éléments finis linéaires d'ordre 3 en temps et en espace. Le schéma est réalisé en deux étapes, suivant le principe de prédiction-correction :

$$\tilde{u}^n = u^n + \alpha\Delta t\frac{\partial u^n}{\partial t} + \beta\Delta t^2\frac{\partial^2 u^n}{\partial t^2} \tag{3.2}$$

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t\left(\Theta_1\frac{\partial u^n}{\partial t} + \Theta_2\frac{\partial \tilde{u}^n}{\partial t}\right) + \Delta t^2\left(\varepsilon_1\frac{\partial^2 u^n}{\partial t^2} + \varepsilon_2\frac{\partial^2 \tilde{u}^n}{\partial t^2}\right) \tag{3.3}$$

avec $\alpha = 1/2-\gamma$, $\beta = 1/6$, $\Theta_1 = 0$, $\Theta_2 = 1$, $\varepsilon_1 = \gamma$ et $\varepsilon_2 = 0$, et où γ est un paramètre permettant de faire varier les propriétés du schéma. Dans AVBP , la valeur de γ communément utilisée est 0.01. Les dérivées temporelles sont retrouvées à partir des dérivées spatiales.

L'intérêt de ce schéma est qu'il possède d'excellentes propriétés à haute fréquence. La figure 3.2 (Colin and Rudgyard [2000]) montre les erreurs de dissipation et de dispersion à $CFL = 0.01$ avec le schéma TTGC (TTGC(0.01)) et d'autres schémas (Lax Wendroff et autres schémas de type Galerkin) en fonction de la fréquence. On remarque que l'erreur de dissipation est faible pour tous les schémas (comprise entre 1 et 0.940) quelle que soit la fréquence. On remarque cependant que le schéma LW-VF est dispersif dès les basses fréquences, alors que les schémas de type Galerkin (dont TTGC) ne deviennent dispersifs qu'à partir d'une certaine fréquence (dans ce cas autour de $p = 0.5\pi$). Ces caractéristiques sont capitales pour la LES, étant donné que la dispersion du schéma peut changer la répartition de l'énergie sur les échelles de turbulence, et donc modifier la physique de l'écoulement (en accumulant beaucoup d'énergie à haute fréquence de manière numérique). Ces propriétés sont aussi intéressantes pour la résolution des sprays. En effet, ce type d'écoulement est caractérisé par la présence de fronts de liquide, c'est-à-dire de zones où on passe d'une charge forte à faible sur une très petite distance, produisant une très forte dispersion avec les schémas centrés d'ordre élevé. La relativement faible erreur de dispersion de TTGC est donc très intéressante pour la phase dispersée. Néanmoins une erreur de dispersion non négligeable subsiste, et il est nécessaire d'appliquer une viscosité artificielle. Ce point est détaillé dans la section 3.3, et est capital dans le cas des écoulements à phase dispersée.

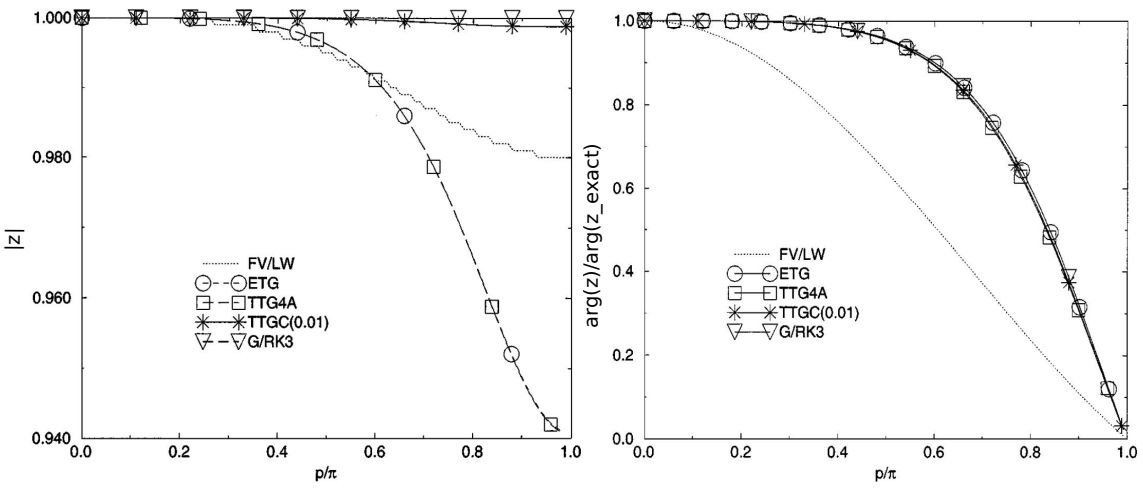


FIGURE 3.2 – erreur de diffusion (gauche, module du facteur d'amplification z) et de dispersion (droite, argument du facteur d'amplification sur argument du facteur d'amplification exact) en fonction de la fréquence pour les différents schémas de AVBP (Colin and Rudgyard [2000]).

3.2.2 Le schéma PSI

Le schéma PSI est un schéma à résidus distribués de type décentré. L'intérêt du décentrement est la possibilité d'obtenir un schéma défini positif et TVD (Total Variation Diminishing) qui rend inutile la viscosité artificielle. Le principe de ce schéma est une distribution du résidu de chaque cellule en fonction de la vitesse de l'écoulement (figure 3.3, Lamarque [2007], Roux [2009]). Les détails de cette section sont issus de Lamarque [2007]. Considérant l'équation de convection linéaire suivante à la vitesse c_i de la quantité u :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c_i \frac{\partial u}{\partial x_i} = 0 \tag{3.4}$$

On peut définir le flux :

$$\mathcal{F}_i = c_i u \tag{3.5}$$

et le résidu R_e à chaque cellule K_e de mesure V_e :

$$R_e = \frac{1}{V_e} \int_{K_e} \frac{\partial \mathcal{F}_i}{\partial x_i} dV \tag{3.6}$$

Dans l'approche cell-vertex présentée ici, l'enjeu est de calculer le résidu N_j des nœuds du maillage :

$$\frac{\mathrm{d}U_j}{\mathrm{d}t} = -N_j \tag{3.7}$$

où U_j est l'évaluation de u au nœud j. Ce résidu est calculé à partir du résidu des cellules adjacentes :

$$N_j = \frac{1}{V_j} \sum_{e \in D_j} D_{j,e} V_e R_e \tag{3.8}$$

où D_j est le volume de contrôle du nœud j et V_j sa mesure. $D_{j,e}$ est ici une matrice de distribution qui permet de partager le résidu du centre de la cellule K_e au nœud j. Tout l'enjeu d'un schéma à résidus distribués est la définition de cette matrice de distribution.

Le principe de la distribution du résidu pour le schéma PSI est que seuls les nœuds en aval de l'écoulement doivent recevoir une contribution du résidu (figure 3.3). Si il y a un seul nœud en aval de l'écoulement, il reçoit tout le résidu. Sinon, on détermine la distribution en projetant la vitesse de l'écoulement le long des arêtes (figure 3.4). Pour cela on introduit les grandeurs suivantes :

$$k_l = -\frac{1}{d} c_i S_{l,i} \tag{3.9}$$

$$k_l^+ = max(0, k_l) \tag{3.10}$$

$$k_l^- = min(0, k_l) \tag{3.11}$$

$$U_{e,in} = \frac{\sum_{l \in K_e} k_l^- U_l}{\sum_{l \in K_e} k_l^-} \tag{3.12}$$

où k_l est la projection du flux sur la normale S_l du nœud l, et où $U_{e,in}$ correspond à la valeur de u dans la cellule K_e au point d'entrée de l'écoulement. Grâce à ces quantités, on peut définir la matrice de distribution du schéma Narrow :

$$D_{j,e}^N = \frac{k_j^+ (U_j - U_{e,in})}{V_e R_e} \tag{3.13}$$

La matrice de distribution du schéma PSI est alors une limitation du schéma Narrow (Sidilkover and Roe [1995]) :

$$D_{j,e}^{PSI} = \frac{max(0, D_{j,e}^N)}{\sum_{l \in K_e} max(0, D_{l,e}^N)} \tag{3.14}$$

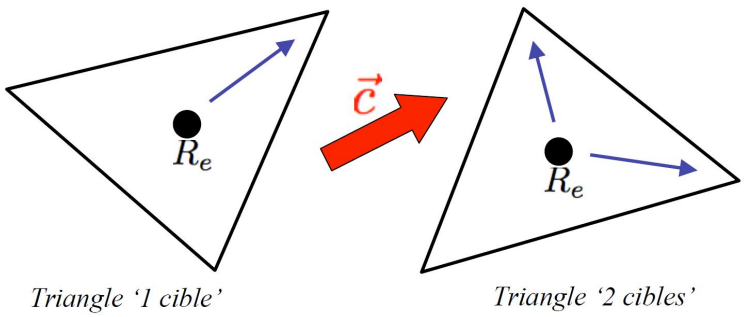


FIGURE 3.3 – Principe des schémas à résidus distribués décentrés : triangle à une cible (un nœud aval, droite) et triangle à deux cibles (deux nœuds aval, gauche).

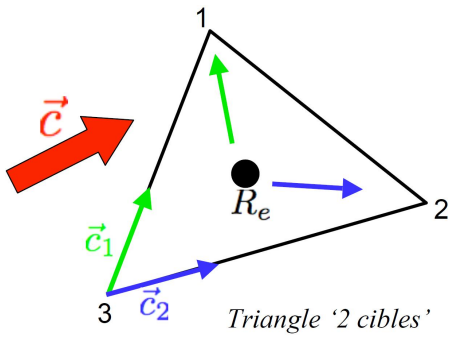


FIGURE 3.4 – Principe de la distribution des résidus pour les schémas Narrow et PSI pour un triangle à deux cibles.

3.3 Viscosité artificielle

La viscosité artificielle dans AVBP a été introduite à l'origine pour la phase gazeuse puis a été étendue à la phase liquide par Kaufmann et al. [2004] et Riber [2007]. La viscosité artificielle permet d'assurer la convergence en dissipant les très forts gradients ou les oscillations haute fréquence. L'idée remonte aux travaux de von Neumann and Richtmeyer [1950] pour le traitement des ondes de choc. Toute la difficulté dans l'utilisation de la viscosité artificielle consiste à assurer la convergence sans pour autant pénaliser la précision du calcul.

Afin de limiter la perte de précision, l'opérateur de viscosité artificielle n'est jamais appliqué sur tout le domaine mais sur des zones marquées par des senseurs. Les senseurs sont des variables normées, définies aux cellules, comprises entre 0 et 1, indicatrices de zones de forte variation locale d'une variable analysée. Le senseur vaut 0 quand aucune viscosité artificielle n'est nécessaire et 1 dans le cas contraire. La viscosité artificielle s'applique de deux façons, soit avec un opérateur du deuxième ordre, soit avec un opérateur du quatrième ordre :

- L'opérateur du deuxième ordre agit comme une viscosité classique. Il diffuse les gradients et introduit de la diffusion artificielle. Le paramètre utilisateur associé à cet opérateur est $\varepsilon^{(2)}$.
- L'opérateur du quatrième ordre agit comme un bi-Laplacien et élimine principalement les hautes fréquences. On l'appelle opérateur d'hyperdiffusion artificielle. Cet opérateur s'applique lorsque le premier opérateur ne s'applique pas. Le paramètre utilisateur associé à cet opérateur est $\varepsilon^{(4)}$.

3.3.1 Les senseurs

Pour la phase gazeuse les senseurs sont basés sur la pression ou l'énergie totale ainsi que sur les fractions massiques des espèces. Pour la phase liquide, le problème est plus compliqué puisqu'il n'y a pas de variable de pression. Certains senseurs analysent donc toutes les variables transportées de la phase

liquide (Riber [2007]) alors que d'autres ne se concentrent que sur certaines variables (Martinez [2010]).

Pour la phase liquide, deux types de senseurs sont utilisés :

– Un senseur ζ_{extr} basé sur les extrema : ce senseur vérifie si les variables de densité de nombre de gouttes, fraction volumique de liquide et diamètre des gouttes ne prennent pas de valeur non physique. Ce senseur est nécessaire du fait que les schémas ne conservent pas les valeurs extrêmes d'une variable et qu'il est possible d'avoir par exemple des fractions volumiques négatives ou supérieures à 1.
– Un senseur ζ_{tpf} basé sur l'analyse de gradients et dont le but est de repérer les instabilités numériques.

Chaque senseur est évalué à la cellule Ω_j, et le maximum de ces deux senseurs est utilisé.

Différentes formulations du senseur ζ_{tpf} sont utilisées dans AVBP et présentées ci-dessous.

Le senseur "Jameson-Riber" (JR)

Le senseur 'Jameson' utilisé sur la phase gazeuse a été adapté à la phase liquide par Riber [2007]. Ce senseur $\zeta^{JR}_{tpf,\Omega_j}$ est en fait le maximum de tous les senseurs appliqués aux variables transportées de la phase liquide. Ainsi :

$$\zeta^{JR}_{tpf,\Omega_j} = \max\left[\zeta_{tpf,\Omega_j}(\alpha_l), \zeta_{tpf,\Omega_j}(u_l), \zeta_{tpf,\Omega_j}(\delta\theta_l), \zeta_{tpf,\Omega_j}(h_l), \zeta_{tpf,\Omega_j}(n_l)\right] \tag{3.15}$$

Pour chaque variable de la phase dispersée S_{tpf}, deux estimations de la variation à la cellule sont utilisées :

$$\Delta^k_1 = S_{tpf,\Omega_j} - S_{tpf,k} \qquad \text{et} \qquad \Delta^k_2 = (\overrightarrow{\nabla} S_{tpf})_k.(\overrightarrow{x}_{\Omega_j} - \overrightarrow{x}_k) \tag{3.16}$$

S_{tpf,Ω_j} est la valeur à la cellule alors que $S_{tpf,k}$ est la valeur au nœud. $(\overrightarrow{\nabla} S_{tpf})_k$ est le gradient de S_{tpf} au nœud k calculé dans AVBP . Δ^k_1 représente la variation de la quantité S_{tpf} dans la cellule alors que Δ^k_2 représente la variation de S_{tpf} sur un stencil plus large puisqu'il utilise les cellules voisines au nœud k.

Ces estimations permettent de définir le senseur de Jameson appliqué à la variable S_{tpf} :

$$\zeta^j_{\Omega_j}(S_{tpf}) = \frac{|\Delta^k_1 - \Delta^k_2|}{|\Delta^k_1| + |\Delta^k_2| + |S_{tpf,k}|} \tag{3.17}$$

Le terme $|S_{tpf,k}|$ au dénominateur est une valeur de référence pour la normalisation, qui permet au senseur de rester défini, si le champ de S_{tpf} est constant et que Δ^k_1 et Δ^k_2. L'adaptation réalisée par Riber [2007] consiste à utiliser des senseurs de 'Jameson' pour toutes les variables de la phase liquide avec des valeurs de normalisation adaptées aux spécificités de la phase liquide.

Les senseurs pour chaque variable sont explicités ci-dessous :

- fraction volumique

$$\zeta_{tpf,\Omega_j}(\alpha_l) = \max_{k\in\Omega_j}\left(\frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{(|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + |\rho_l\alpha_{l,k}|}\right)^2 \tag{3.18}$$

- vitesse

$$\zeta_{tpf,\Omega_j}(u_l) = \max_{k\in\Omega_j}\left(\frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + \rho_l c_{\Omega_j}}\right) \tag{3.19}$$

où c_{Ω_j} est une mesure locale de la vitesse caractéristique évaluée par : $c_{\Omega_j} = V_{\Omega_j}^{1/3}/\Delta t$, où V_{Ω_j} représente le volume de la cellule. Les fluctuations nœud à nœud sur la vitesse sont faibles par rapport à cette vitesse locale sauf si de fortes oscillations apparaissent. Par conséquent le senseur $\zeta_{tpf,\Omega_j}(u_l)$ reste petit sauf si de forts gradients locaux de vitesse sont détectés.

- RUE

$$\zeta_{tpf,\Omega_j}(\delta\theta_l) = \frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + |\rho_l\alpha_{l,k}\delta\theta_{l,k}|} \tag{3.20}$$

- enthalpie

$$\zeta_{tpf,\Omega_j}(h_l) = \frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + |\rho_l\alpha_{l,k}h_{l,k}|} \tag{3.21}$$

- densité en nombre de gouttes

$$\zeta_{tpf,\Omega_j}(n_l) = \left(\frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{(|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + n_{l,k})}\right)^2 \tag{3.22}$$

Le principal défaut de ce senseur est qu'il s'active très souvent puisqu'il est calculé sur toutes les variables. De plus le senseur de Jameson a été conçu pour des écoulements aérodynamiques stationnaires et a tendance à se déclencher beaucoup trop souvent dans des simulations LES.

Le senseur de "Colin"

Devant les limitations du senseur de Jameson, Colin [2000] a proposé un nouveau senseur ne se déclenchant pas quand l'écoulement est suffisamment résolu et se déclenchant fortement pour les zones de forte non-linéarité. Le senseur de Colin pour la phase liquide est identique à la formulation de Colin pour la phase porteuse. Il s'applique à toutes les variables transportées de la phase liquide. Ce senseur est défini par :

$$\zeta^C_{tpf,\Omega_j} = \frac{1}{2}\left(1+\tanh\left(\frac{\Psi-\Psi_0}{\delta}\right)\right) - \frac{1}{2}\left(1+\tanh\left(\frac{-\Psi_0}{\delta}\right)\right) \tag{3.23}$$

avec :

$$\Psi = \max_{k\in\Omega_j}\left(0, \frac{\Delta^k}{|\Delta^k|+\varepsilon_1 S_{tpf,k}}\zeta^J_k\right) \tag{3.24}$$

$$\zeta^J_k = \frac{|\Delta^k_1 - \Delta^k_2|}{|\Delta^k_1|+|\Delta^k_2|+S_{tpf,k}} \tag{3.25}$$

$$\Delta^k = |\Delta^k_1 - \Delta^k_2| - \varepsilon^k \max\left(|\Delta^k_1|, |\Delta^k_2|\right) \tag{3.26}$$

$$\varepsilon^k = \varepsilon_2\left(1-\varepsilon_3\frac{\max\left(|\Delta^k_1|, |\Delta^k_2|\right)}{|\Delta^k_1|+|\Delta^k_2|+\ S_{tpf,k}}\right) \tag{3.27}$$

Les valeurs numériques utilisées dans AVBP ont été fixées par Colin [2000] :

$$\Psi_0 = 2.10^{-2} \qquad \delta = 1.10^{-2} \qquad \varepsilon_1 = 1.10^{-2} \qquad \varepsilon_2 = 0.95 \qquad \varepsilon_3 = 0.5 \tag{3.28}$$

Le senseur de "Colin-Martinez" (CM)

Ce senseur est adapté de la formulation du senseur Colin. Il a été créé pendant la thèse de Martinez [2010] spécialement pour le cas de l'injection directe. La principale différence avec le senseur classique de Colin est qu'au lieu d'utiliser une valeur au nœud pour la normalisation, on utilise une valeur moyenne à la cellule. De plus les variables utilisées pour l'identification des instabilités numériques ne sont pas les mêmes.

Comme le senseur détecte un problème déjà existant, donc *a posteriori*, la valeur au nœud peut être extrême et si elle est utilisée comme valeur de normalisation, le senseur est sous estimé (valeur très grande) ou sur-estimé (valeur très petite). Inversement si la valeur est petite, le senseur est sur-estimé. De plus une variable comme la fraction volumique de liquide peut varier en espace de plusieurs ordres de grandeur : prendre une valeur moyenne à la cellule permet d'avoir une valeur de normalisation moins locale et plus représentative du champ. On aurait pu prendre une valeur encore plus filtrée en prenant la

moyenne sur toutes les cellules adjacentes à la cellule Ω_j, mais cela aurait entraîné un surcoût de calcul trop important en comparaison du bénéfice. Le senseur est calculé à partir de la fraction volumique et du diamètre des gouttes. Le senseur sur la fraction volumique permet de contrôler la masse de liquide qui subit de forts gradients. Le diamètre n'est pas une variable transporté. Il est reconstruit à partir de la fraction volumique de liquide et de la densité en nombre par la relation :

$$d = \left(\frac{6\alpha_l}{n_l\pi}\right)^{1/3} \tag{3.29}$$

Si les champs de fraction volumique et de densité en nombre sont strictement proportionnels, alors l'erreur numérique est identique pour ces deux variables et le diamètre reste constant. Dans le cas où ces deux champs ne sont pas proportionnels (en évaporation par exemple), ils sont propagés différemment et les erreurs numériques sont différentes. Le diamètre résultant est très sensible aux erreurs numériques et s'avère un bon indicateur.

De plus, le diamètre intervient directement dans le calcul des termes d'échange avec la phase porteuse, et il est important de contrôler son erreur pour ne pas entrer dans une boucle instable.

Le senseur final est le maximum du senseur sur le diamètre et du senseur sur la fraction volumique :

$$\zeta^{CM}_{tpf,\Omega_j} = \max\left[\zeta_{tpf,\Omega_j}(\alpha_l), \zeta_{tpf,\Omega_j}(d_l)\right] \tag{3.30}$$

$$\zeta_{tpf,\Omega_j} = \frac{1}{2}\left(1+\tanh\left(\frac{\Psi'-\Psi_0}{\delta}\right)\right) - \frac{1}{2}\left(1+\tanh\left(\frac{-\Psi_0}{\delta}\right)\right) \tag{3.31}$$

avec :

- fraction volumique de liquide :

$$\Psi'(\alpha_l) = \max_{k\in\Omega_j}\left(0, \frac{\Delta^k}{|\Delta^k| + K_1\varepsilon_1\rho_l\alpha_{l,\Omega_j}}\zeta^J_k(\alpha_l)\right) \tag{3.32}$$

et :

$$\zeta^J_k(\alpha_l) = \frac{|\Delta^k_1 - \Delta^k_2|}{|\Delta^k_1| + |\Delta^k_2| + 5\rho_l\alpha_{l,k}} \tag{3.33}$$

- diamètre moyen :

$$\Psi'(d_l) = \max_{k\in\Omega_j}\left(0, \frac{\Delta^k}{|\Delta^k| + 2\varepsilon_1 d_{l,\Omega_j}}\zeta^J_k(d_l)\right) \tag{3.34}$$

et :

$$\zeta^J_k(d_l) = \frac{|\Delta^k_1 - \Delta^k_2|}{|\Delta^k_1| + |\Delta^k_2| + K_2 d_{l,k}} \tag{3.35}$$

Les autres paramètres numériques sont identiques à ceux utilisés pour le senseur de Colin classique. Le senseur CM peut être adapté aux conditions de l'écoulement grâce aux paramètres K_1 et K_2. Ces deux paramètres déterminent la valeur de normalisation des senseurs. En pratique, le paramètre K_2 pour le diamètre est fixé à 2, et seul le paramètre K_1 pour la fraction volumique est modifié. L'influence de ce paramètre est étudiée dans la section suivante, pour des valeurs $K_1 = 5$ et $K_1 = 10$. On utilisera les notations CM1, CM5 et CM10 pour les senseurs CM avec $K1 = 1, 5$ et 10. Le senseur CM1 est équivalent au senseur Colin.

3.4 Analyse préliminaire des senseurs de viscosité artificielle

Le but de cette section est d'évaluer de manière analytique les senseurs de viscosité artificielle. Dans la section 3.3.1, on a vu que les fortes non-linéarités étaient évaluées par les quantités Δ_1 et Δ_2 (Eq. 3.16), qui peuvent être assimilées à deux évaluations du gradient à un nœud du maillage. La non-linéarité est croissante avec la différence entre ces deux évaluations.

La figure 3.5 montre la valeur des senseurs JR (gauche) et Colin (droite) en fonction des gradients Δ_1 et Δ_2, pour une valeur de référence de 20. On remarque une grande différence dans la manière dont s'activent ces deux formes de senseur. Le senseur JR s'active très progressivement à partir d'une très faible non-linéarité, alors que le senseur Colin montre bien son comportement en tangente hyperbolique, s'activant brusquement à partir d'une valeur seuil.

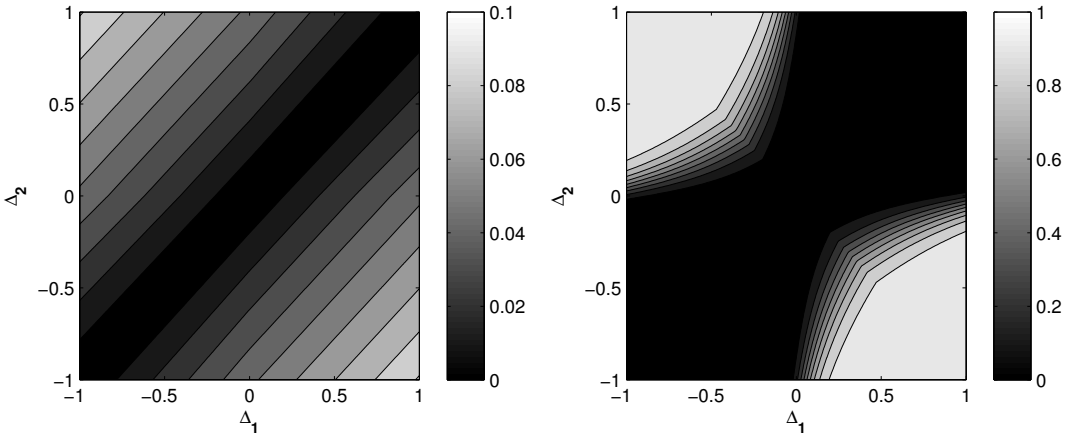


FIGURE 3.5 – Valeur du senseur de viscosité artificielle en fonction des gradients Δ_1 et Δ_2 avec une valeur de référence de 20, pour le senseur JR (gauche) et le senseur Colin (droite).

Sur la figure 3.6, on compare ici 4 senseurs : JR, Colin, CM5 et CM10. On remarque de nouveau que le senseur JR s'active de manière linéaire en fonction de la discontinuité, là où les senseurs de type

Colin (Colin, CM5 et CM10) s'activent brusquement à partir d'une valeur seuil. On voit ici l'intérêt des senseurs CM. En effet, en modifiant la valeur de référence par un certain facteur (5 pour CM5, 10 pour CM10), on retarde l'activation de la viscosité artificielle, et on laisse les non-linéarités se développer, ce qui peut être un critère important pour ne pas trop détériorer la précision du schéma. Le senseur JR s'active dès qu'une faible non-linéarité se développe, ce qui réduit la précision du schéma (même si cela amène plus de robustesse). Le choix de la constante du senseur CM est cependant un paramètre à fixer en fonction de l'application, même si la valeur 5 a déjà fonctionné dans de nombreux cas (Martinez [2010], Sanjosé [2009],Vié et al. [2010b]).

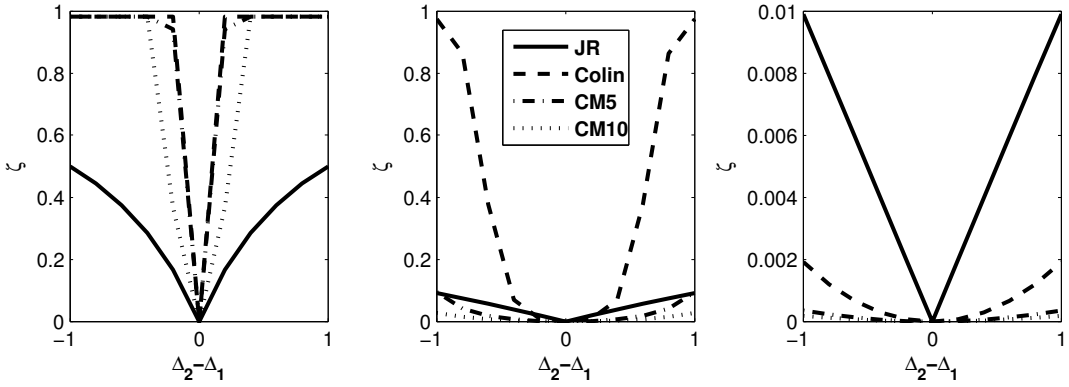


FIGURE 3.6 – Valeur du senseur de viscosité artificielle en fonction de la différence entre les deux gradients $\Delta_2 - \Delta_1$ avec une valeur de référence de 1 (gauche), 10 (centre)et 100 (droite), pour les senseurs JR (cercles), Colin (triangles vers la droite), CM5 (triangles vers le haut) et CM10 (carrés).

3.5 Evaluation en convection pure 1D

Les performances des schémas de transport sont évaluées sur des cas 1D de convection pure. Nous étudions ici 3 stratégies numériques :

- le schéma TTGC + senseur JR,
- le schéma TTGC + senseur CM5,
- le schéma PSI sans viscosité artificielle.

3.5.1 Description du cas test

Le cas test de convection à vitesse constante est classique puisqu'il répond à une équation simple :

$$\frac{\partial}{\partial t} m_l + u_{l,m} \frac{\partial}{\partial x_m} m_l = 0 \tag{3.36}$$

Il permet cependant de montrer les premières limites des stratégies numériques en imposant des conditions initiales mal discrétisées et/ou avec de fortes discontinuités.

Le maillage 2D de dimension $1m$ sur $1m$ est périodique selon la direction x et les conditions limites à $y = 0$ et $y = 1$ sont des murs glissants pour le liquide. La discrétisation selon x est de 25, 50, 100, 200, 400 ou 1000 cellules, et de 1 cellule selon y. Les discrétisations à 25 et 50 cellules correspondent à ce qu'on retrouve dans un calcul applicatif (10 points pour discrétiser une gaussienne dans Martinez et al. [2009], Martinez [2010]). La vitesse du gaz est nulle (calcul sans traînée). La vitesse du liquide est de $20m/s$ et est constante sur tout le domaine. Le nombre de CFL pour le liquide est 0.03 (proche de l'application finale de cette thèse). La condition initiale est choisie gaussienne ou en créneau sur la densité en nombre de gouttes, et constante en diamètre :

$$\text{Gaussienne :} \qquad n_l(x) = 1 + 100.\exp\left(\frac{-(x-0.5)^2}{0.1^2}\right) \tag{3.37}$$

$$\text{Créneau :} \qquad n_l(x) = 100 \quad si \quad 0.3 < x < 0.7 \tag{3.38}$$

$$= 1 \quad sinon \tag{3.39}$$

Pour tous les tests avec TTGC, les coefficients de viscosité artificielle sont $\varepsilon^{(2)} = 0.01$ et t $\varepsilon^{(4)} = 0.001$. Deux types d'erreur sont étudiées : l'erreur globale et l'erreur locale. L'erreur globale est l'erreur relative en norme L2 entre la solution numérique et la solution exacte :

$$E_{globale} = \frac{\int_0^1 (n_l(x) - n_{l,exact}(x))^2 dx}{\int_0^1 n_{l,exact}(x)^2 dx} \tag{3.40}$$

L'erreur locale est l'erreur relative entre la solution numérique et la solution exacte en chaque point du domaine de calcul :

$$E_{locale}(x) = \frac{(n_l(x) - n_{l,exact}(x))^2}{n_{l,exact}(x)^2} \tag{3.41}$$

3.5.2 Condition initiale gaussienne

La condition gaussienne est une condition relativement régulière qui correspond aux profils radiaux injectés dans l'application finale de cette thèse (Senoner et al. [2009a]) ou pour l'injection Diesel dans Martinez et al. [2010]. La figure 3.7 compare pour les 6 discrétisations la solution numérique après un cycle ($t_{cycle} = 0.05$s), pour les trois stratégies numériques étudiées. On remarque que les trois méthodes ne présentent aucune dispersion numérique pour ce cas test, quelle que soit la discrétisation. Le schéma PSI est naturellement sans dispersion, le schéma TTGC n'en présente pas grâce à la viscosité artificielle. D'un point de vue précision, on remarque que seule la méthode TTGC+CM5 est capable de capturer l'amplitude du signal gaussien à 25 cellules, là où il faut 200 cellules avec la méthode TTGC+JR, et là où même 1000 cellules sont insuffisantes pour le schéma PSI.

Sur la figure 3.8, on compare l'erreur globale pour les trois méthodes numériques en fonction de la discrétisation. La tendance observée sur la figure 3.7 est confirmée, à savoir que la méthode la moins précise est le schéma PSI, la méthode TTGC+CM5 est la plus précise, et la méthode TTGC+JR est

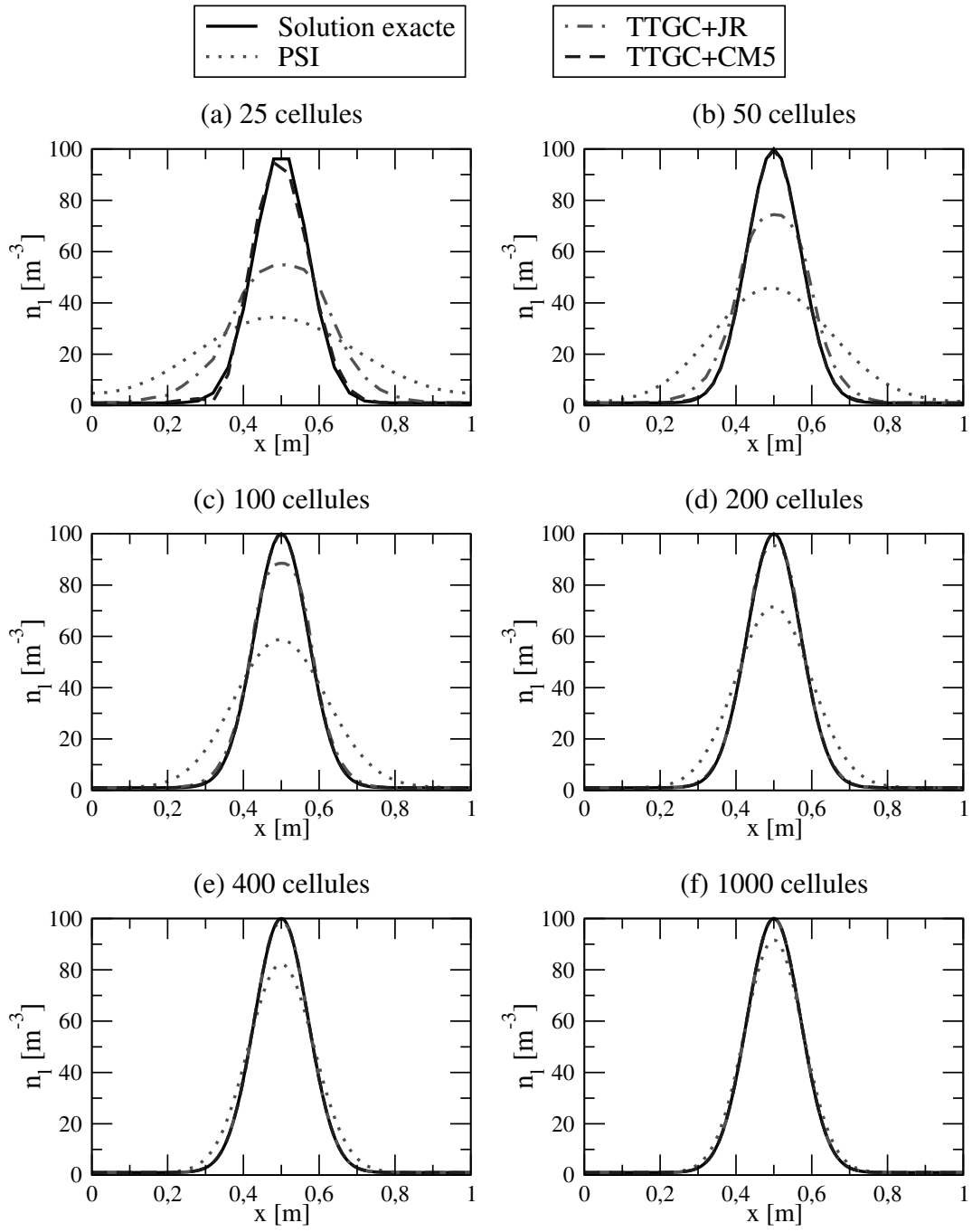


FIGURE 3.7 – Comparaison des profils de densité de nombre de gouttes entre la solution exacte (ligne continue) et la solution après un cycle pour PSI (ligne pointillée), TTGC+JR (ligne point-tiret), et TTGC+CM5(ligne discontinue), pour 25 (a), 50 (b), 100 (c), 200 (d), 400 (e) et 1000 (f) cellules, pour une solution initiale gaussienne

intermédiaire. On remarquera surtout une large supériorité de TTGC+CM5 par rapport aux deux autres

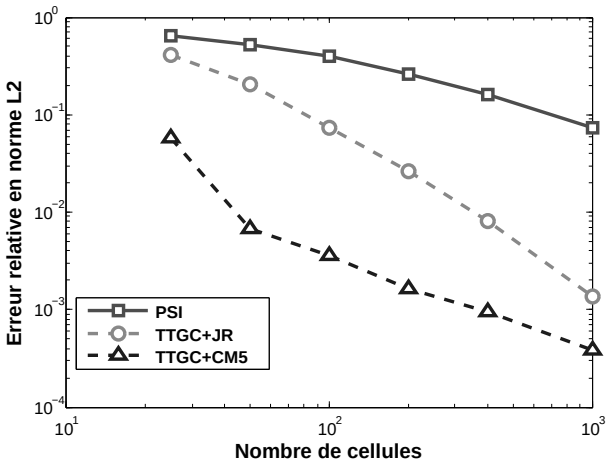


FIGURE 3.8 – Erreur relative en norme L2 de la convection d'une gaussienne en fonction du nombre de cellules, pour PSI (carrés), TTGC+JR (cercles) et TTGC+CM5 (triangles).

méthodes à faible résolution.

On peut aussi remarquer que les erreurs des méthodes TTGC+JR et TTGC+CM5 ont tendance à se rejoindre pour les grandes résolutions, ceci étant dû à la diminution de l'importance de la viscosité artificielle avec la diminution de la taille de maille. C'est ce que confirme la figure 3.9, où on compare l'erreur locale de TTGC+JR et TTGC+CM5. On note que les erreurs deviennent progressivement identiques, d'abord à l'extérieur de la gaussienne, puis progressivement vers l'intérieur, confirmant la diminution de la sensibilité à la viscosité artificielle.

3.5.3 Condition initiale en créneau

La condition en créneau correspond à l'injection. C'est la condition la plus difficile à reproduire, en raison de la très forte dispersion numérique des schémas d'ordre élevé sur les zones de forts gradients (Vichnevetsky and Bowles [1982]).

La figure 3.10 compare les résultats des trois méthodes après un cycle. La méthode TTGC+CM5 est celle qui capture le mieux le front, mais au prix d'une forte erreur de dispersion. Les méthodes TTGC+JR et PSI ne présentent pas de dispersion, mais diffusent beaucoup le profil, la méthode PSI étant la plus diffusive. On remarque aussi que le maximum du créneau n'est capturé qu'avec un nombre excessif de cellules, alors que la méthode TTGC+CM5 ne respecte pas le principe du maximum.

La figure 3.11 compare les erreurs globales des trois stratégies. Cette fois, la vitesse de convergence est identique pour les trois méthodes, mais la méthode TTGC+CM5 reste toujours la plus précise et la méthode PSI reste la moins précise.

Si on s'intéresse à l'erreur locale des stratégies TTGC (figure 3.12), la tendance est la même que

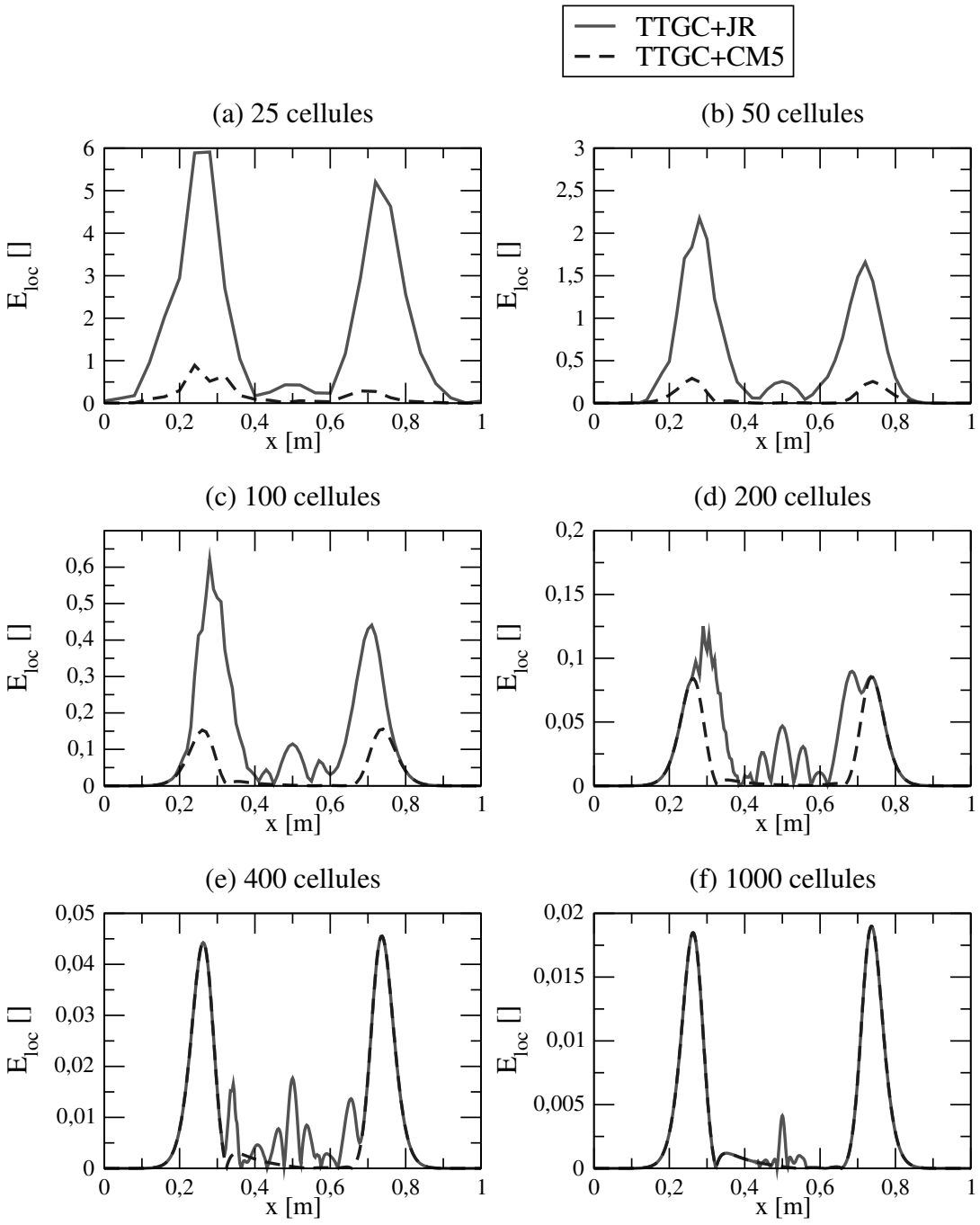


FIGURE 3.9 – Erreur relative locale de la convection d'une gaussienne pour TTGC+JR (ligne continue) et TTGC+CM5 (ligne discontinue), pour 25 (a), 50 (b), 100 (c), 200 (d), 400 (e) et 1000 (f) cellules.

précédemment. L'erreur de TTGC+CM5 est toujours inférieure à celle de TTGC+JR dans la zone de front, là où elle est la plus importante. Cependant l'erreur est plus grande pour TTGC+CM5 dans la zone de maximum du créneau, en raison de l'erreur de dispersion élevée.

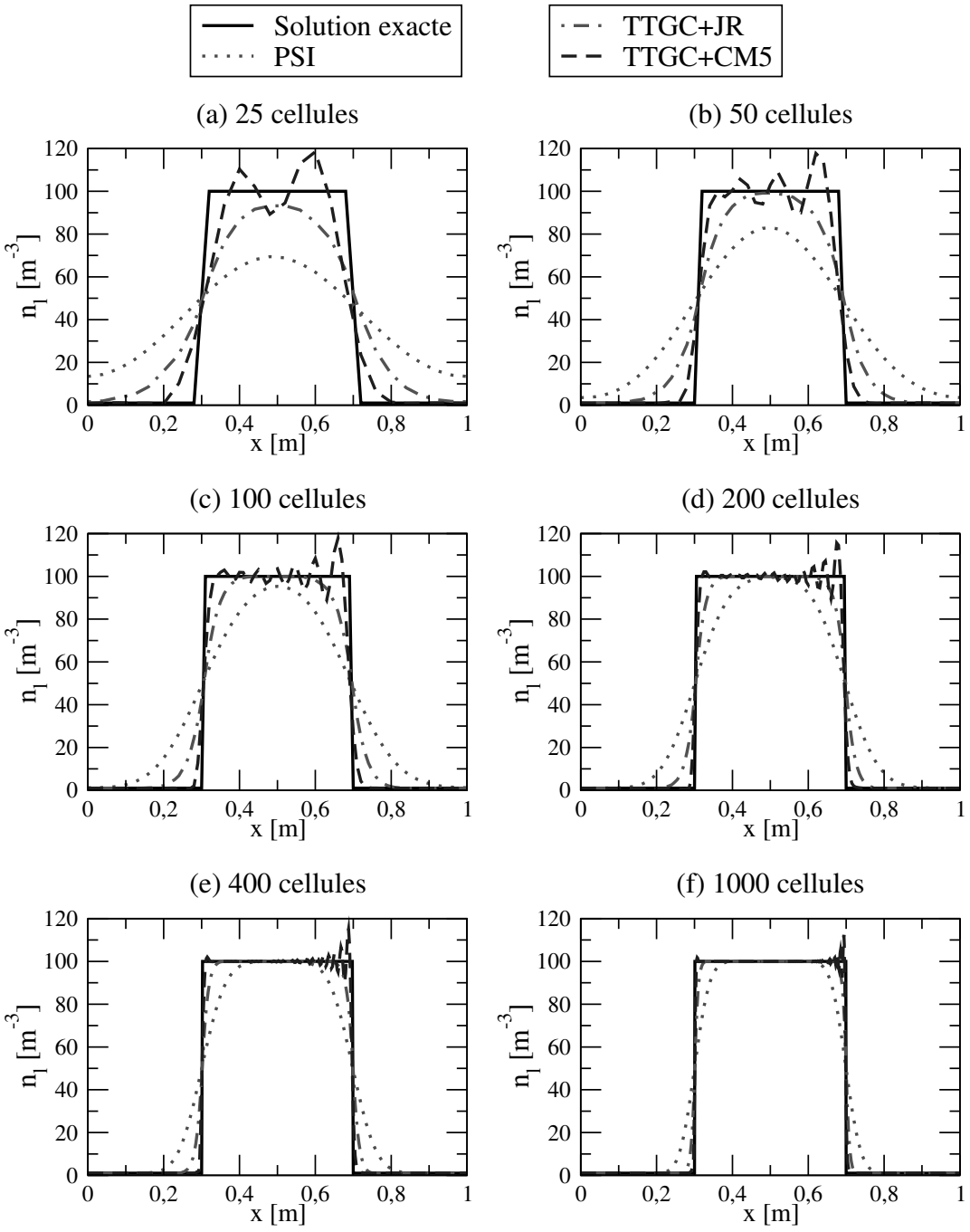


FIGURE 3.10 – Comparaison des profils de densité de nombre de gouttes entre la solution exacte (ligne continue) et la solution après un cycle pour PSI (ligne pointillée), TTGC+JR (ligne point-tiret), et TTGC+CM5 (ligne discontinue), pour 25 (a), 50 (b), 100 (c), 200 (d), 400 (e) et 1000 (f) cellules, pour une solution initiale en créneau.

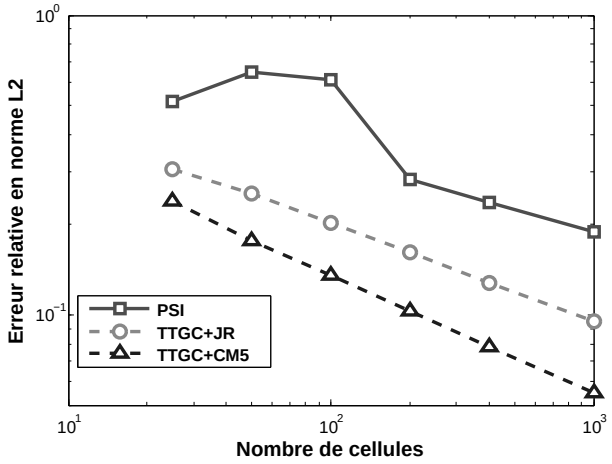


FIGURE 3.11 – Erreur relative en norme L2 de la convection d'un créneau en fonction du nombre de cellules, pour PSI(carrés), TTGC+JR(cercles) et TTGC+CM5(triangles).

3.6 Conclusion sur le traitement numérique de la phase dispersée

Les approches numériques disponibles dans AVBP ne sont pas tout-à-fait satisfaisantes. En effet, le schéma PSI est robuste, et respecte la positivité de la phase dispersée, mais est très diffusif. D'un autre côté, le schéma TTGC est délicat à utiliser, notamment pour le traitement des faibles fractions volumiques. Cela montre bien la nécessité de nouveaux schémas pour la phase dispersée dans AVBP.

Dans cette optique, les schémas cinétiques sont très prometteurs. Notamment utilisés pour la simulation de plasmas, ces schémas sont basés sur une reconstruction de la fdp à partir des moments. Ces méthodes ont un avantage fondamental sur toutes les approches numériques, parce qu'elles préservent l'espace des moments. De plus, l'avancement en temps est exact. Tout l'enjeu est dans le choix de la reconstruction de la fdp, qui détermine les propriétés numériques du schéma. Un tel schéma a été intégré au code MUSE3D (de Chaisemartin [2009]) et appliqué au calcul 3D sur maillage structuré dans les travaux de de Chaisemartin [2009]. Il a aussi été utilisé sur des méthodes d'évaporation d'ordre élevé dans Massot et al. [2010] et Kah [2010]. Cependant l'adaptation au calcul sur maillage non-structuré ou hybrides reste à faire. De plus, il est adapté pour les équations de transport fluide sans terme de pression (type "gaz sans pression"), et une adaptation aux équations de type gaz avec pression n'a pas été envisageable à ce jour.

Pour s'attaquer à ce problème, Boileau et al. [2010] proposent un schéma hybride traitant les deux types de dynamique : gaz sans pression et gaz avec pression. Les deux dynamiques sont traitées avec un schéma de relaxation (Chalons and Coulombel [2008]), et le choix de la solution sans pression ou avec pression est fait à partir d'un certain seuil d'énergie interne. De plus, ces schémas traitent les zones de vide. Ils sont cependant toujours écrits en maillages structurés.

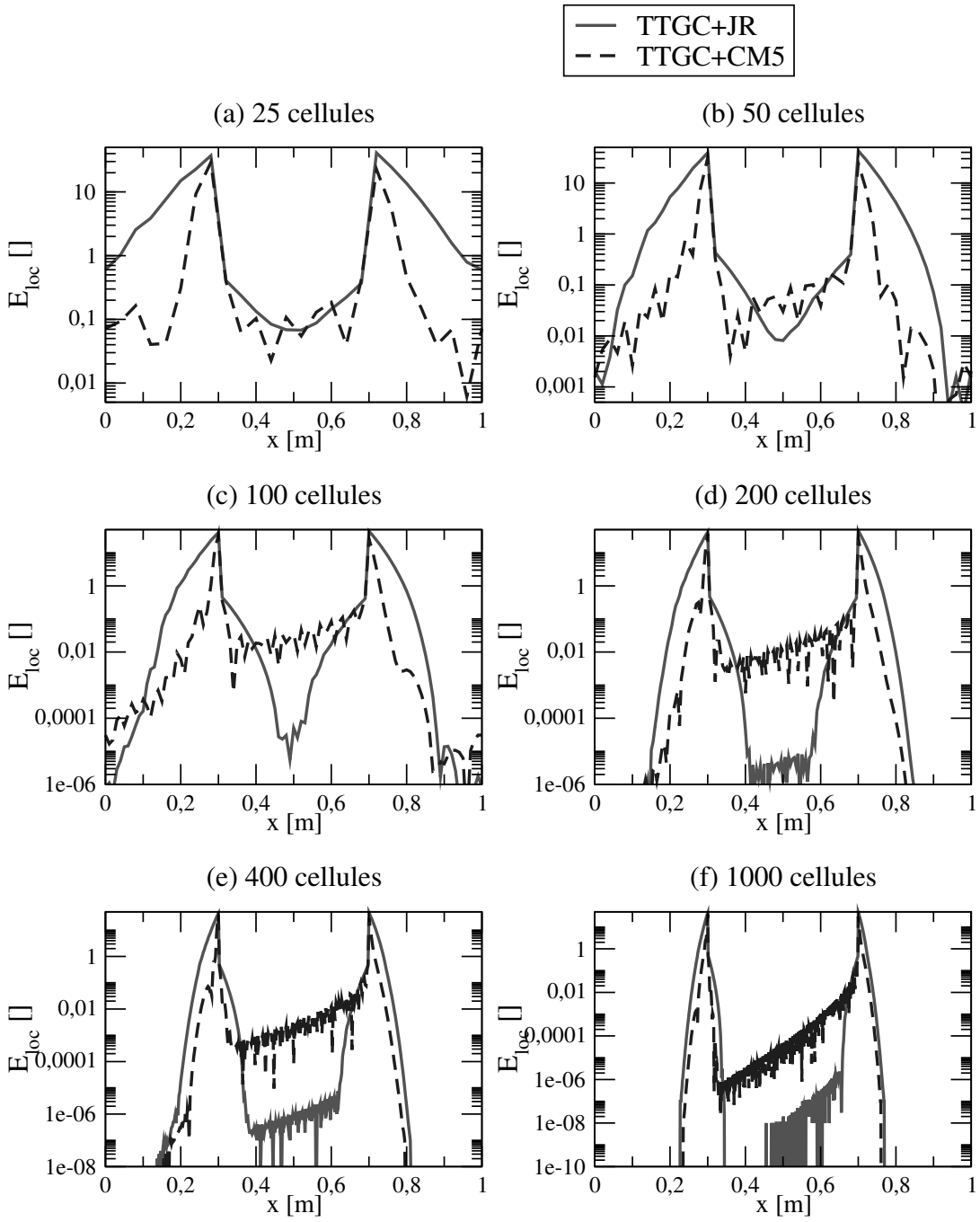


FIGURE 3.12 – Erreur relative locale de la convection d'un créneau pour TTGC+JR (ligne continue) et TTGC+CM5 (ligne discontinue), pour 25 (a), 50 (b), 100 (c), 200 (d), 400 (e) et 1000 (f) cellules.

Chapitre 4

Validation du FEM en Turbulence Homogène Isotrope décroissante chargée

Les équations du FEM et du FEMM comportent plusieurs termes faisant appel à des fermetures théoriques qui nécessitent d'être validées. On se propose ici d'étudier le cas de la turbulence homogène isotrope décroissante chargée en particules. Ce genre de configuration a déjà été étudiée par Moreau [2006] avec des simulations DPS (Discrete Particle Simulation) qui nous serviront de référence pour valider le FEM.

4.1 Turbulence Homogène Isotrope (THI)

La turbulence homogène isotrope est la configuration la plus simple pour étudier certains phénomènes de turbulence. En effet, l'isotropie autorise une analyse théorique des grandeurs caractéristiques de la turbulence, statistiquement identiques en tout point de l'écoulement. Les détails sur les caractéristiques d'un tel écoulement sont disponibles dans Chassaing [2000], et plus particulièrement dans Riber [2007] pour le cas test étudié ici. Le maillage de cas test est un cube de 2πmm de côté composé de 64^3 cellules, périodique dans toutes les directions. Pour initier la THI, on utilise ici un spectre de Passot-Pouquet (Passot and Pouquet [1987]) :

$$E(k,t) = \frac{16u'^2_{f,t}}{k_e}\sqrt{\frac{2}{\pi}}\left(\frac{k}{k_e}\right)^4 \exp\left(-2\left(\frac{k}{k_e}\right)^2\right) \tag{4.1}$$

où E est l'énergie fonction de la fréquence k, et k_e la fréquence la plus énergétique. Ce spectre analytique a la particularité de concentrer toute l'énergie autour de k_e. Il ne permet pas de reproduire la zone inertielle du spectre et est donc limité aux faibles nombres de Reynolds. Il génère cependant un champ suffisamment turbulent pour agir sur la dynamique des particules. Les paramètres du champ turbulent généré ici sont résumés dans le tableau 4.2. Les variables d'adimensionnalisation sont données dans le tableau 4.1, où les variables adimensionnées sont signalées par l'exposant '+'.

TABLE 4.1 – Constantes d'adimensionnalisation.

$U_{ref}(m.s^{-1})$	$L_{ref}(m)$	$t_{ref}(s)$	$\mu_{ref}(kg.m^{-1}.s^{-1})$
34.7	10^{-3}	2.8818 10^{-6}	2.02 10^{-3}

TABLE 4.2 – Paramètres d'initialisation du spectre de Passot-Pouquet : vitesse turbulente u', longueur d'onde la plus énergétique $l_e = 2\pi/k_e$, viscosité dynamique μ_f, et masse molaire $\mathcal{M}_f$.

u'^+	l_e^+	$\mu_f(kg.m^{-1}.s^{-1})$	$\mathcal{M}_f(kg.mol^{-1})$
0.1	2.2	2.02 10^{-3}	29.0 10^{-3}

Le spectre théorique et le spectre généré ne sont pas identiques du fait de la discrétisation. De plus, le champ de vitesse généré est à divergence nulle et donc ne vérifie pas l'équation de quantité de mouvement. Pour obtenir un spectre physique, on réalise une simulation préalable pendant un temps caractéristique des grandes structures $t_0 = 4.233 t_{ref}$ (Riber [2007]). Les différences entre spectres théorique, généré, et après un temps t_0 sont visibles sur la figure 4.1.

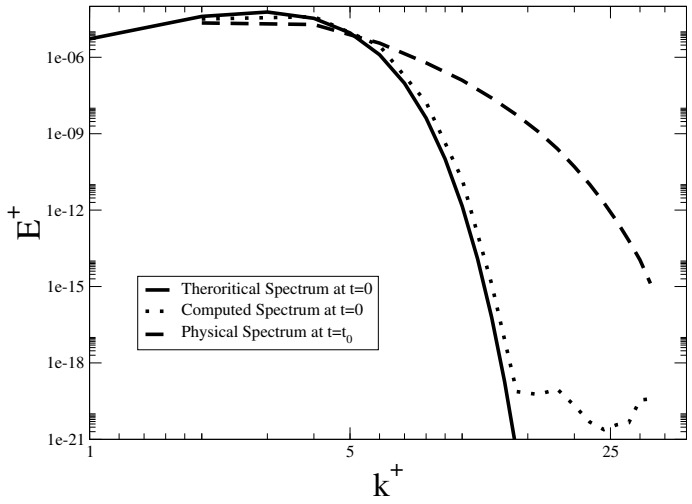


FIGURE 4.1 – Spectre de Passot-Pouquet : comparaison entre spectre théorique (ligne continue), spectre généré à $t = 0$ (ligne pointillée), et spectre à $t = t_0$.

Le résultat de AVBP est comparé au résultat de NTMIX (Vermorel et al. [2003]) qui est obtenu avec un schéma de 6ème ordre. La validation se fait par rapport aux lois de décroissance de l'énergie cinétique du gaz en fonction du temps. Les propriétés de la turbulence à $t = 0$ et $t = t_0$ sont listées dans le tableau 4.3. La figure 4.2 montre que AVBP produit des résultats proches de NTMIX, et que les solutions obtenues avec les deux codes sont proches de la solution analytique.

TABLE 4.3 – Paramètres de la phase gazeuse à $t = 0$ et $t = t_0$ où ε est la dissipation, Re_t le nombre de Reynolds turbulent, l_t l'échelle intégrale, η l'échelle de Kolmogorov, τ_L le temps de l'échelle intégrale et τ_K le temps de Kolmogorov.

	$u_f'^+$	ε^+	Re_t	l_t^+	η^+	τ_L^+	τ_K^+
$t = 0$	0.0991	0.0014	15.39	0.768	0.0961	5.205	1.871
$t = t_0$	0.0781	0.00106	12.95	0.819	0.103	4.302	2.160

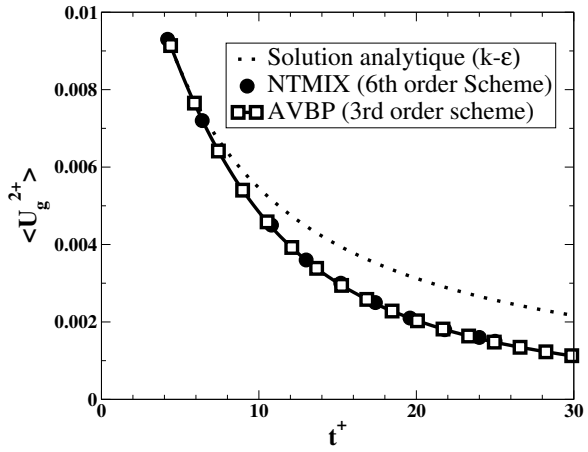


FIGURE 4.2 – Décroissance de l'énergie turbulente de la THI : solution analytique obtenue d'après le modèle k-ε (ligne pointillée), calcul NTMIX (cercles pleins), calcul AVBP (carrés vides).

4.2 THI diphasique

A $t = t_0$, on injecte les particules de manière homogène ($n_l = cte$, avec $U_g(x) = U_l(x)$. Les caractéristiques de la phase liquide sont définies dans le tableau 4.4.

TABLE 4.4 – Paramètres de la phase liquide injectée en THI à $t = t_0$.

τ_p^+	St_L	St_K	$\rho_l(kg.m^{-3})$	$d_l(\mu m)$	U_l
5.47	1.2	2.5	1916	17.3	U_g

Pour qualifier l'écoulement fluide-particule, on détermine deux nombres de Stokes :

$$St_L = \frac{\tau_p}{\tau_L} \tag{4.2}$$

$$St_K = \frac{\tau_p}{\tau_K} \tag{4.3}$$

où τ_l et τ_K sont les temps caractéristiques de l'échelle intégrale de la turbulence et de l'échelle de

Kolmogorov (Chassaing [2000]). Le nombre de Stokes St_K est très important pour qualifier les effets de concentration préférentielle. En effet, le maximum de ségrégation est obtenu autour de $St_K = 1$ (Simonin et al. [2006]). Dans ce régime, les particules sont éjectées des zones de forte vorticité, pour s'accumuler dans les zones de faible vorticité, comme on peut le voir sur la figure 4.3.

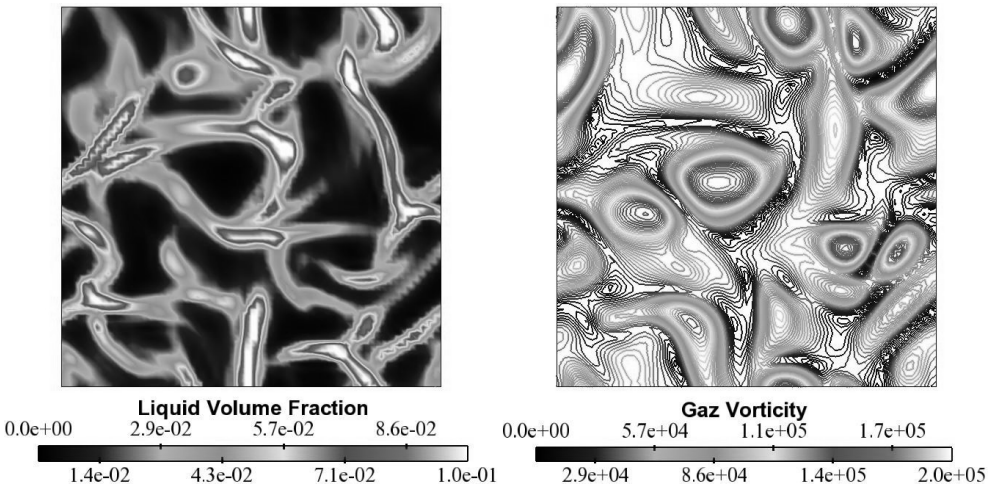


FIGURE 4.3 – Turbulence Homogène Isotrope (plan de coupe médian selon z) : fraction volumique de liquide (gauche) et vorticité du gaz (droite).

Pour évaluer les effets de concentration préférentielle, on fait appel à une fonction de dispersion (Simonin et al. [2006]), ici associée à la taille des cellules Δx :

$$g_{pp}^{\Delta x} = \frac{\langle n_p^2(\vec{x}) \rangle}{\langle n_p(\vec{x}) \rangle^2} \tag{4.4}$$

Notre but ici est de valider le formalisme eulerien mésoscopique. On se propose donc d'étudier les effets de concentration préférentielle et de décroissance énergétique induits par une turbulence homogène et isotrope. Les particules sont distribuées de manière homogène.

Les résultats obtenus par le formalisme eulérien mésoscopique sont comparés aux résultats de DPS (Discrete Particle Simulation) obtenus avec NTMIX. D'après Elgobashi and Truesdell [1992], la DPS est capable de capturer les composantes essentielles du mouvement des particules, et est donc un outil fiable pour valider le FEM. Les calculs sont effectués sans considérer l'effet du liquide sur le gaz ("one-way coupling").

La décroissance énergétique de la phase liquide peut être vue sous plusieurs angles : l'énergie du mouvement mésoscopique est notée $< U_l^{2+} >$, l'énergie du mouvement décorrélé $< \delta\Theta_l^+ >$, et l'énergie totale $< U_l^{2+} > + < \delta\Theta_l^+ >$. La figure 4.4 trace les différentes contributions énergétiques pour le FEM et la DPS. Le calcul FEM est en excellent accord avec le calcul DPS en terme d'énergie totale et d'énergie du mouvement moyen. On remarque aussi que l'énergie du mouvement décorrélé est faible par rapport

à celle du mouvement moyen. Elle est retracée sur la figure 4.5, montrant une comparaison satisfaisante. Si on s'intéresse aux effets de concentration préférentielle, on remarque d'après la figure 4.6 que les résultats du FEM en terme de dispersion sont en très bon accord avec la simulation DPS.

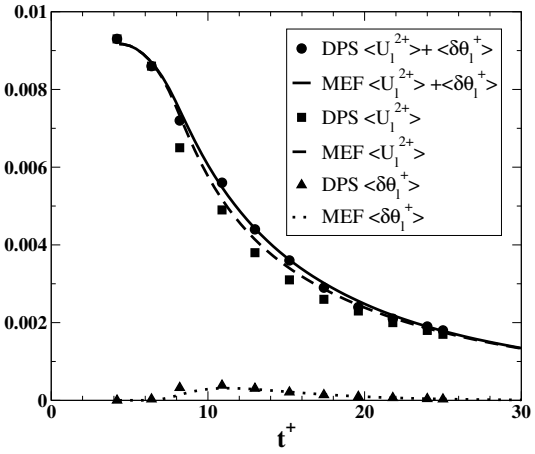


FIGURE 4.4 – Evolution de l'énergie moyenne de la phase dispersée : énergie totale obtenue par DPS (cercles) et par FEM (ligne continue) ; énergie corrélée obtenue par DPS (carrés) et FEM (ligne discontinue) ; énergie décorrélée obtenue par DPS (triangles) et FEM (ligne pointillée).

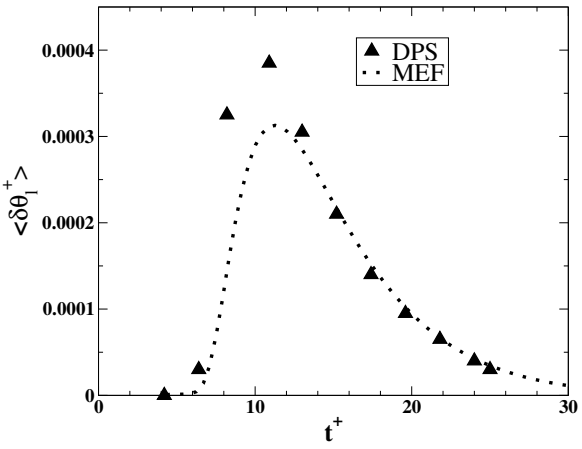


FIGURE 4.5 – Evolution de l'énergie décorrélée : DPS (triangles) et FEM (ligne pointillée).

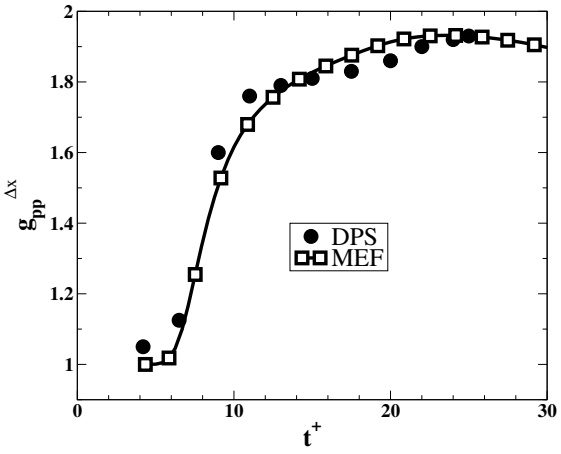


FIGURE 4.6 – Evolution de la fonction de dispersion : DPS (cercles) et FEM (carrés).

4.3 Influence des paramètres numériques

Les résultats précédents ont été obtenus avec la stratégie numérique exposée au chapitre précédent, ce qui a permis d'améliorer les résultats de Riber [2007] et Roux [2009]. On se propose ici d'analyser l'influence des senseurs de viscosité artificielle utilisés dans AVBP sur ce cas complexe. La figure 4.7 compare les champs de densité de nombre de gouttes et de senseur de viscosité artificielle obtenus avec le senseur JR et le senseur CM5. On remarque que les gradients sont plus marqués dans la simulation CM5 que dans la simulation JR. Ceci est confirmé par les champs de senseur de viscosité artificielle. Le senseur JR s'applique plus fortement que le senseur CM5, surtout là où le nombre de gouttes est le plus important, alors que le senseur CM5 s'applique principalement dans les zones de vide (limitation dûe à l'impossibilité de simuler un nombre de gouttes nul en schéma centré).

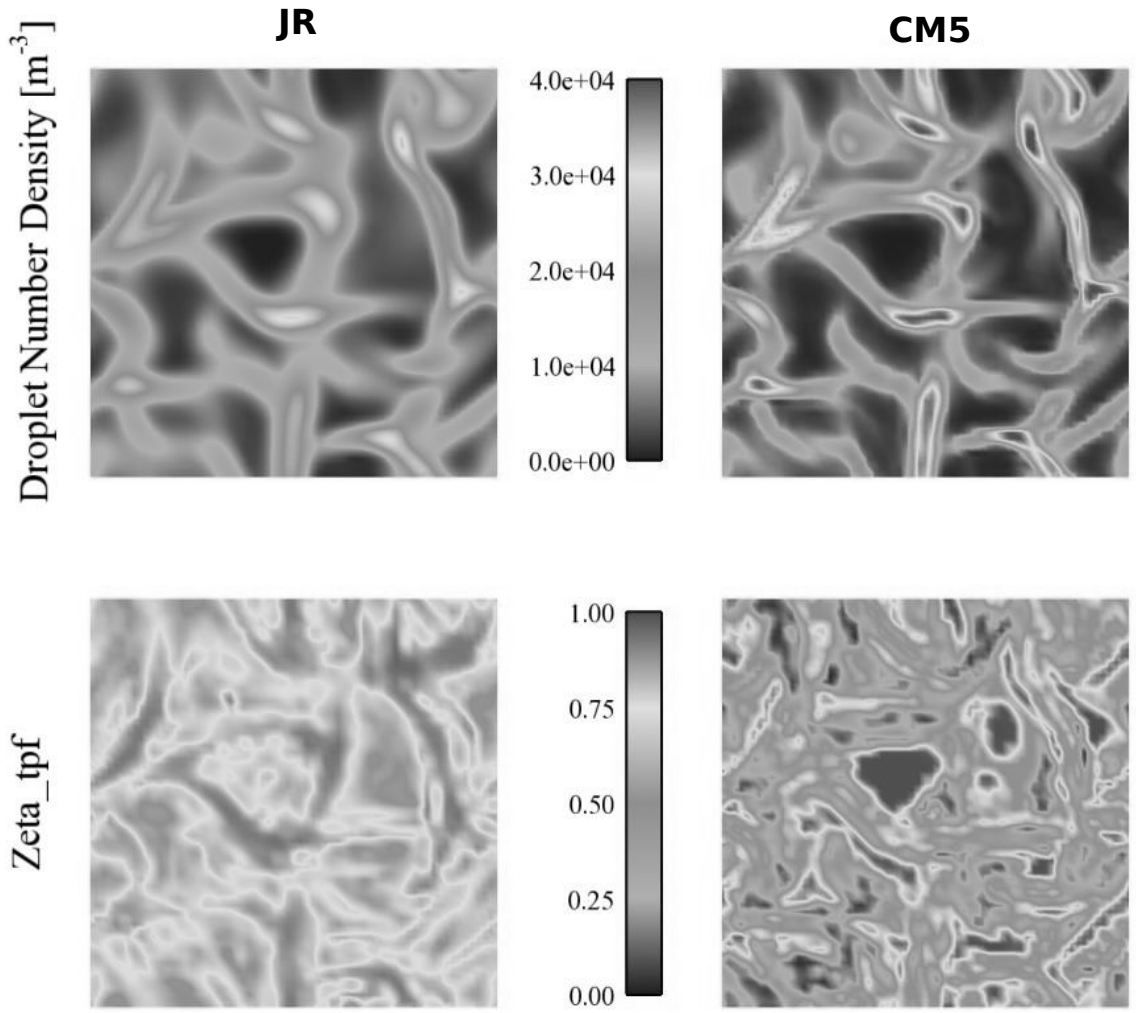


FIGURE 4.7 – Champs de densité de nombre de gouttes (haut) et senseur de viscosité artificielle (bas) pour le senseur JR (gauche) et le senseur CM5 (droite).

La figure 4.8 montre la fonction de dispersion en fonction du temps, obtenue avec les senseurs JR, CM5 et CM10. On remarque clairement que JR sous-estime grandement la ségrégation en raison de sa forte dissipation, alors que le senseur CM10 permet de retrouver la solution lagrangienne. Le senseur CM5 étant un intermédiaire entre JR et CM10, sa ségrégation se situe entre les deux courbes. On notera que les trois méthodes représentent cependant la même évolution de la ségrégation à un point d'inflexion, là où la solution lagrangienne en compte deux. La reproduction de ces points d'inflexion n'a été obtenue à ce jour en eulérien qu'avec le schéma FCT par Roux [2009]. Ce schéma montrait cependant trop de dissipation pour reproduire le niveau de ségrégation, mais reste une voie intéressante d'amélioration.

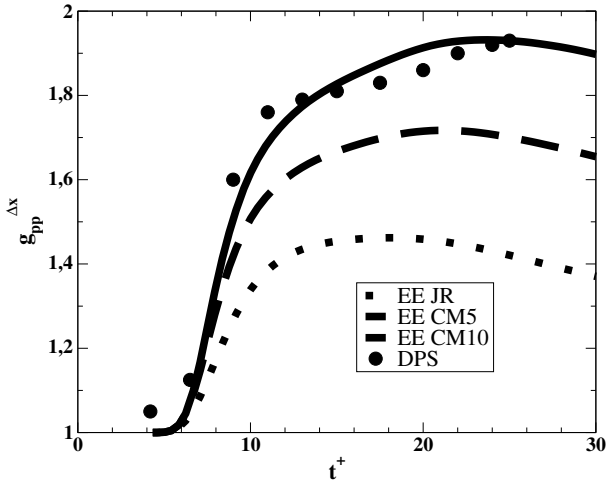


FIGURE 4.8 – Evolution de la fonction de dispersion en fonction du temps pour le calcul lagrangien (cercles), et les calculs eulériens avec les senseurs JR (ligne pointillée), CM5 (ligne discontinue) et CM10 (ligne continue).

Enfin, pour analyser complètement l'impact de la viscosité artificielle, on compare sur la figure 4.9 l'évolution temporelle de la moyenne du produit $\zeta.\varepsilon^{(2)}$ où ζ est le senseur, et $\varepsilon^{(2)}$ le niveau de viscosité artificielle. Cette quantité représente la viscosité artificielle effective appliquée au calcul. La viscosité artificielle effective est beaucoup plus importante avec JR sur l'ensemble, alors que les senseurs CM5 et CM10 permettent de réduire ce niveau à 75% et 50% respectivement.

Sur la figure 4.10, on compare la moyenne de la viscosité artificielle effective en fonction de la fraction volumique de liquide à un instant donné. On remarque que JR s'applique majoritairement et fortement sur les grandes valeurs de fraction volumique, empêchant d'atteindre des hauts niveaux de ségrégation, alors que CM10 s'applique plus faiblement sur l'ensemble des valeurs de fraction volumique, avec une brusque montée vers les valeurs très faibles pour forcer la fraction volumique à rester positive.

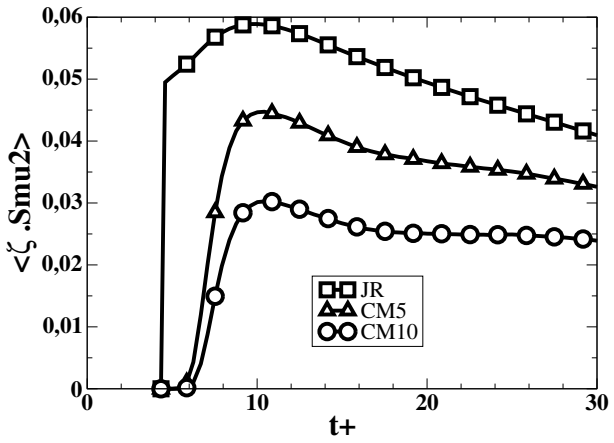


FIGURE 4.9 – Évolution de $\zeta.\varepsilon^{(2)}$ en fonction du temps pour les senseurs JR(carrés), CM5 (triangles) et CM10 (cercles).

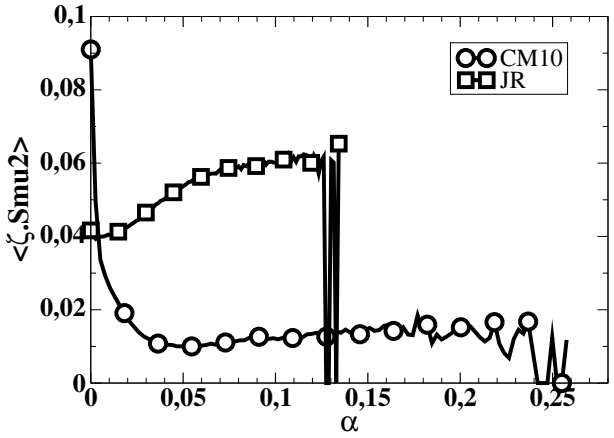


FIGURE 4.10 – Evolution de $\zeta.\varepsilon^{(2)}$ en fonction de la fraction volumique pour les senseurs JR (carrés) et CM10 (cercles).

4.4 Conclusions sur la THI

Deux points ont été abordés sur ce cas test de la turbulence homogène isotrope : l'aspect modélisation et l'aspect numérique.

Concernant l'aspect modélisation, le FEM (et donc le FEMM) a montré sa capacité à capturer la dynamique d'une phase dispersée dans un écoulement turbulent pour un nombre de Stokes modéré (proche de 1). Les résultats en terme de fonction de dispersion montrent un très bon accord avec la DPS. Les énergies totales et moyennes sont bien reproduites, et l'énergie décorrélée, caractéristique d'un écoulement turbulent, est relativement bien capturée. Concernant l'aspect numérique, l'influence du choix du senseur de viscosité artificielle a été évaluée, et montre une nécessité de réduire au maximum l'applica-

tion de viscosité artificielle. Le senseur CM10 montre ici de bien meilleurs résultats que les senseurs JR et CM5. Tous ces résultats confirment cependant la nécessité de nouveaux schémas numériques.

Chapitre 5

Validation des effets de polydispersion en taille

5.1 Effet de traînée

Un des impacts importants du caractère polydisperse d'une phase dispersée est associé à la traînée. En effet, la force de traînée dépendant du diamètre des particules, transporter un écoulement polydisperse uniquement avec son diamètre moyen peut engendrer des erreurs importantes sur les trajectoires des particules. Pour évaluer cet impact, le cas test du jet en écoulement transverse est utilisé ici.

5.1.1 Paramètres du cas test

La configuration est représentée sur la figure 5.1. Le maillage est cartésien, de 75 cellules selon y et 125 cellules selon x. Le liquide est injecté dans un écoulement de gaz uniforme, perpendiculairement à la vitesse du gaz. L'injection de liquide est polydisperse de telle sorte que les gouttes suivront des trajectoires différentes (figure 5.2). Les paramètres du cas test sont résumés dans les tableaux 5.1 et 5.2. Ce type de cas test a déjà été étudié dans la thèse de Mossa [2005], avec un modèle eulérien polydisperse à pdf présumé. Le modèle obtenait de bons résultats, mais trop de paramètres étaient à ajuster pour pouvoir être appliqué de manière générique sur des applications variées.

5.1.2 Résultats

Sur la figure 5.3 sont comparés les résultats du calcul monodisperse et du calcul multi-fluide. On voit clairement l'influence de la polydispersion sur ce type d'écoulement cisaillé. La dispersion spatiale est complètement différente, ce qui est dû à l'effet de la traînée différenciée en fonction de la taille de goutte. Cependant, on voit apparaître des zones de vide entre les trajectoires de chaque section (figure 5.3, gauche). Cela est dû à l'absence de la non-prise en compte du flux décorrélé de nombre de gouttes, qui

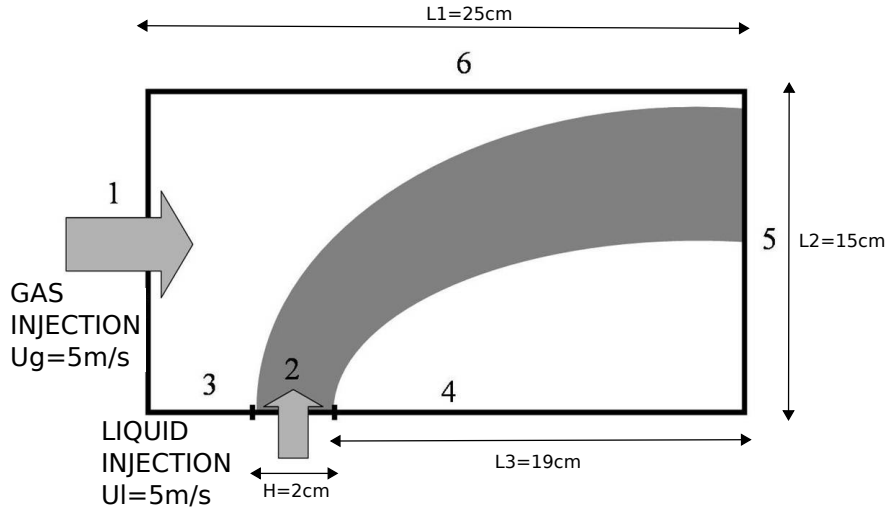


FIGURE 5.1 – Schéma du cas test du jet en écoulement transverse.

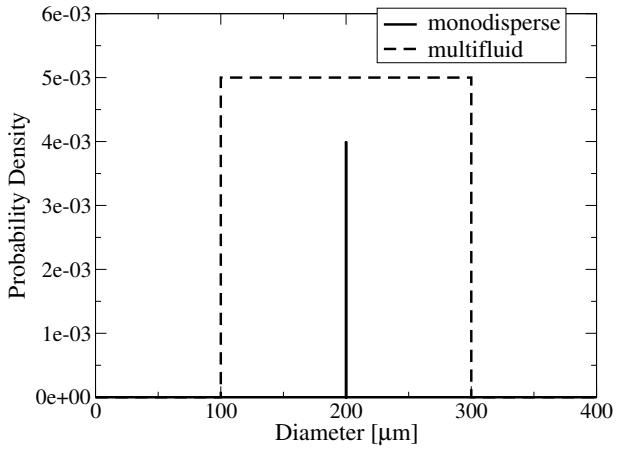


FIGURE 5.2 – Fdp du jet en écoulement transverse : approche monodisperse (ligne continue, cette courbe n'est pas normalisée) et approche multi-fluide (ligne tiretée).

permettrait de différencier les trajectoires entre gouttes de tailles différentes dans une même section. L'importance de cet effet est cependant dépendante du cas et du nombre de sections.

La figure 5.4 compare la répartition en diamètre sur la face de sortie (5 sur la figure 5.1) obtenue par un calcul à 5 sections, un calcul à 10 sections et un calcul lagrangien de référence (calcul effectué sous Matlab). On remarque que les deux calculs eulériens sont en bon accord avec la solution lagrangienne, ce qui confirme un bon comportement vis-à-vis de la traînée. Cependant des oscillations importantes apparaissent pour les deux cas eulériens, dues à la fois au schéma numérique et l'absence de flux décorrélé de nombre de gouttes. L'absence du flux décorrélé impose des zones de vide entre les sections pour lesquelles la notion de diamètre moyen n'a plus de sens physique. Le fait que le schéma numérique

TABLE 5.1 – Conditions aux limites du jet en écoulement transverse.

	Gaz	Liquide
1	Injection de type Dirichlet $U_g = 5m.s^{-1}$	Injection de type Dirichlet $U_l = 5m.s^{-1}$, $n_l^{tot} = 10^6 m^{-3}$
2	Mur glissant	Injection de type Dirichlet $U_l = 5m.s^{-1}$, $n_l^{tot} = 10^9 m^{-3}$
3	Mur glissant	Mur glissant
4	Mur glissant	Mur glissant
5	Sortie en pression de type NSCBC (Poinsot and Lele [1992])	Sortie de type Dirichlet
6	Sortie en pression de type NSCBC	Sortie de type Dirichlet

TABLE 5.2 – Paramètres numériques du jet en écoulement transverse.

	Gaz	Liquide
Schéma numérique	TTGC	TTGC
Viscosité artificielle	Jameson	CM5
$\varepsilon^{(2)}$	0.05	0.02
$\varepsilon^{(4)}$	0.005	0.002

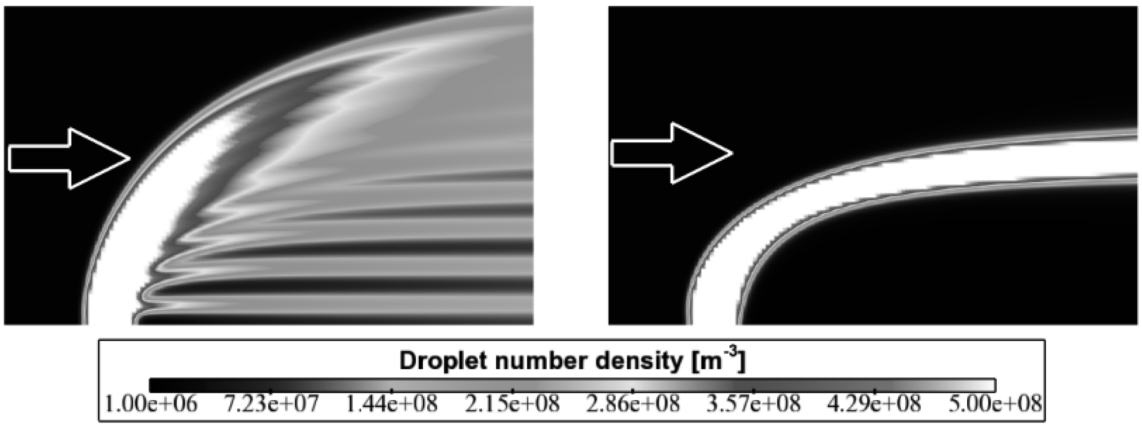


FIGURE 5.3 – Jet en écoulement transverse 2D : champs de densité de nombre de gouttes obtenus avec l'approche multi-fluide (10 sections, gauche) et l'approche monodisperse (droite).

impose un nombre de gouttes minimum impose ici un diamètre moyen pour le vide de 200μm).

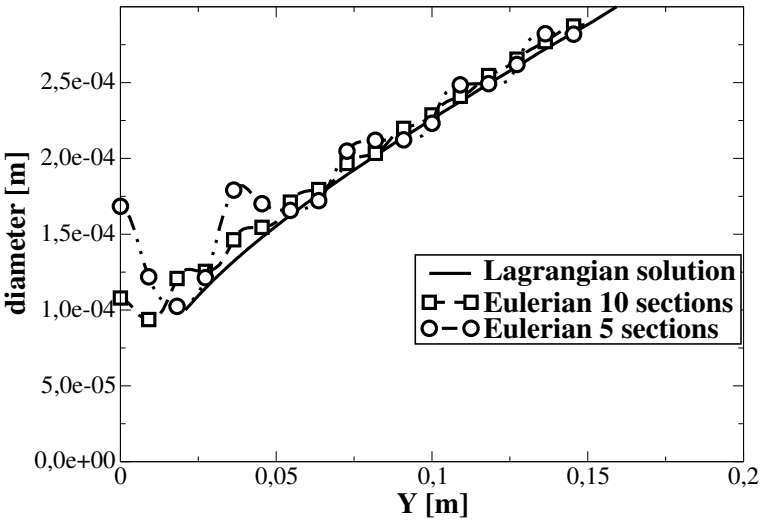


FIGURE 5.4 – Comparaison du diamètre moyen d10 en fonction de la coordonnée verticale sur la condition limite de sortie , pour un calcul lagrangien (ligne continue), un calcul eulérien à 5 sections (cercles), et un calcul eulérien à 10 sections (carrés).

5.2 Évaporation

De même que la traînée, l'évaporation est un phénomène fortement conditionné par la taille. On se propose d'étudier ici les modèles d'évaporation sur trois cas test 0D (Laurent [2006], Dufour and Villedieu [2005]). Dans l'EWB, l'hypothèse 0D annule les termes dépendant de la position et de la vitesse. De plus, on considère un cas à température constante. L'EWB se résume donc à :

$$\frac{\partial f_p}{\partial t} + R_S \frac{\partial f_p}{\partial S} = 0 \tag{5.1}$$

Cette équation correspond à une advection dans l'espace des tailles à la vitesse R_S. Par souci de simplification, la vitesse d'évaporation R_S est supposée constante et égale à 1.

5.2.1 Description du cas test

Pour évaluer la qualité des modèles, trois conditions initiales dans l'espace des tailles sont proposées : gaussienne, créneau, et double pic. La condition gaussienne est la plus proche des applications Moteur où les distributions en taille sont plutôt continues et régulières. La condition créneau évalue les propriétés de positivité et de dispersivité de l'approche. Enfin la condition double pic est plus proche d'applications aérospatiales, où les propergols solides respectent des fdp de ce type. Nous verrons par la suite que cette condition est la plus extrême. Les conditions initiales définies dans l'intervalle en surface [0 1] sont les suivantes :

$$\text{Gaussienne :} \quad f(S) = \exp\left(\frac{-(S-0.5)^2}{0.2^2}\right) \tag{5.2}$$

$$\text{Créneau :} \quad f(S) = 0 \quad si \quad S < 0.6 \tag{5.3}$$

$$= 1 \quad sinon \tag{5.4}$$

$$\text{Double pic :} \quad f(S) = \frac{1}{1+10000(S-0.3)^2} + \frac{0.1}{1+10000(S-0.7)^2} \tag{5.5}$$

On étudie ici un modèle multi-fluide d'ordre 1, et le nouveau modèle multi-fluide d'ordre 2 développé dans cette thèse. Ces deux modèles ont été implantés dans un code Matlab. Les analyses proposées ici sont très largement inspirées des travaux de Dufour [2005] et Laurent [2006]. La méthode multi-fluide faisant appel à une reconstruction de la fdp dans l'espace des tailles, l'erreur initiale liée à cette reconstruction peut être évaluée comme le maximum de la différence entre fdp exacte et fdp reconstruite :

$$E_{recons} = \max_S \| \frac{f_{reconstruit}(S) - f_{exacte}(S)}{f_{exacte}(S)} \| \tag{5.6}$$

L'erreur initiale sur les moments à partir desquels on reconstruit la fdp est nulle à $t = 0$. L'erreur faite sur la masse totale est évaluée de cette façon :

$$E_{globale} = \max_t \| \frac{M_S^{3/2}(t) - M_{S,exact}^{3/2}(t)}{M_{S,exact}^{3/2}(t)} \| \tag{5.7}$$

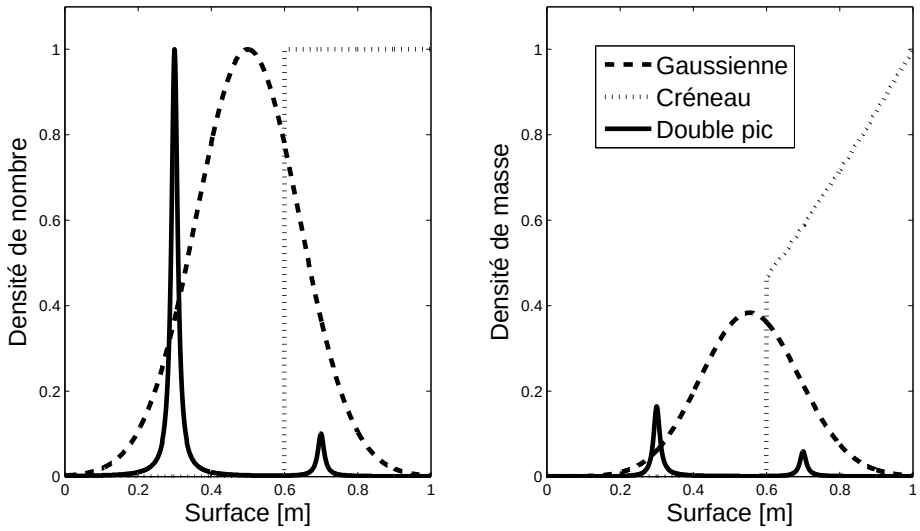


FIGURE 5.5 – Condition initiale de densité de nombre (gauche) et de masse (droite) : gaussienne (triangles), double pic (triangles vers la droite) et créneau (carrés).

D'un point de vue coût calcul, il n'est pas raisonnable de dépasser 10 sections (ce qui est déjà beaucoup), et on sera donc très attentif au comportement des modèles pour ce nombre de sections.

5.2.2 Condition initiale gaussienne

La figure 5.6 compare la solution initiale gaussienne à sa représentation initiale en multi-fluide d'ordre 1 et en multi-fluide d'ordre 2, pour 5, 10, 20 et 100 sections. Il est important de noter que le modèle multi-fluide d'ordre 1 ne transporte qu'un moment (la masse), et ne peut donc vérifier exactement le nombre de gouttes total à l'instant initial. Pour ce modèle, on voit que la reconstruction constante par morceaux ne permet pas de reproduire la fdp à faible nombre de sections, et ne devient précise qu'à partir de 100 sections. Le modèle d'ordre 2 est plus précis et donne une reconstruction à 10 sections déjà satisfaisante. La reconstruction à 5 sections est également intéressante, avec cependant des portions de la reconstruction à l'ordre 1.

La figure 5.7 donne l'erreur de reconstruction définie par l'Eq.5.6 des modèles d'ordre 1 et d'ordre 2. La méthode d'ordre 1 atteint une précision de 1% pour 100 sections, là où la méthode d'ordre 2 n'a besoin que de 10 sections. Le comportement à grand nombre de sections vérifie bien les ordres de deux méthodes.

La figure 5.8 montre l'évolution de la masse totale pour la solution exacte, le modèle d'ordre 1 et le modèle d'ordre 2. Comme pour la reconstruction de la fdp, il faut un très grand nombre de sections à l'ordre 1 pour être précis sur la masse, alors que 10 sections sont suffisantes à l'ordre 2. De plus les résultats de l'ordre 2 avec 5 sections sont déjà très satisfaisants.

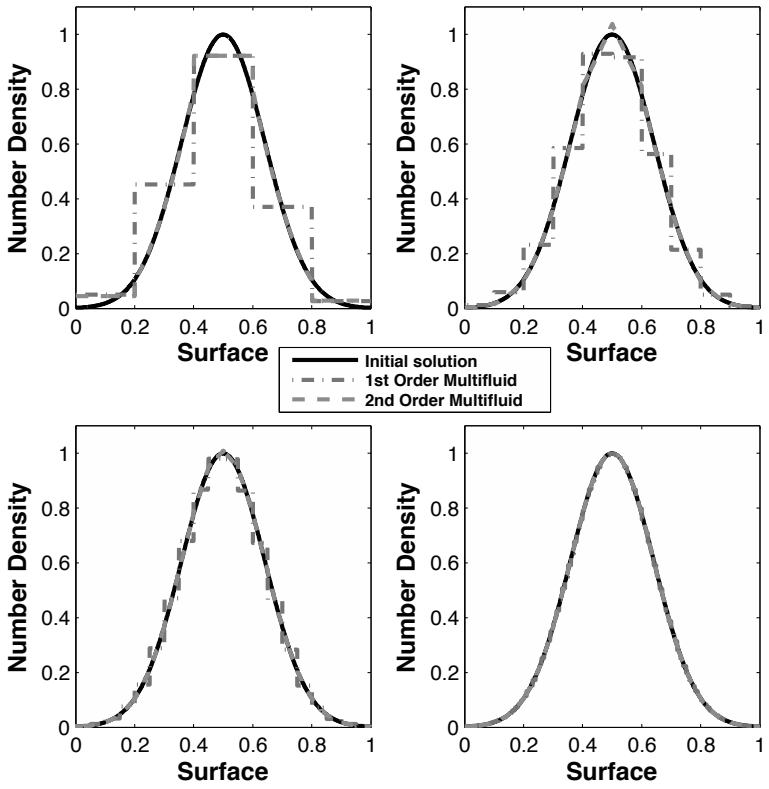


FIGURE 5.6 – Reconstruction initiale de la condition gaussienne pour 5 (en haut à gauche), 10 (en haut à droite), 20 (en bas à gauche) et 100 (en bas à droite) sections : solution initiale (ligne continue), modèle d'ordre 1 (ligne point-tiretée) et modèle d'ordre 2 (ligne tiretée).

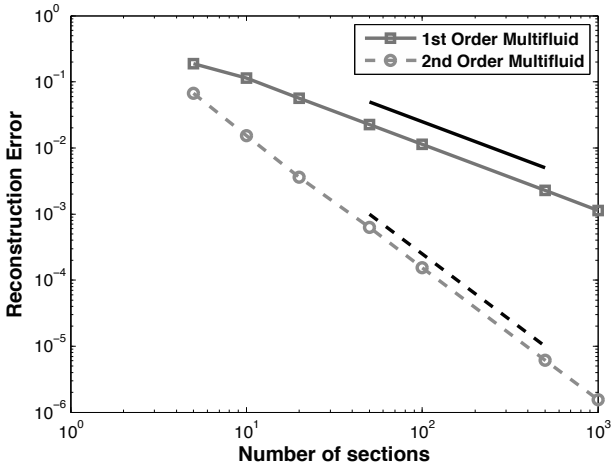


FIGURE 5.7 – Erreur de reconstruction en fonction du nombre de sections pour la condition initiale gaussienne avec le modèle d'ordre 1 (carrés) et le modèle d'ordre 2 (cercles).

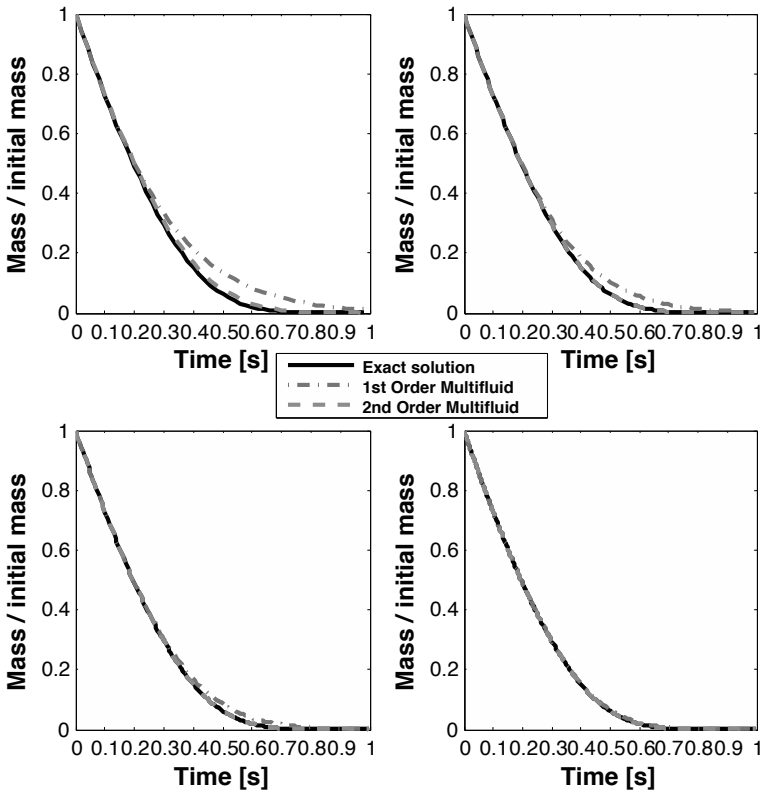


FIGURE 5.8 – Evolution de la masse totale rapportée à la masse initiale pour la solution initiale gaussienne avec 5 (en haut à gauche), 10 (en haut à droite), 20 (en bas à gauche) et 100 (en bas à droite) sections : solution exacte (ligne continue), modèle d'ordre 1 (ligne point-tiretée) et modèle d'ordre 2 (ligne tiretée).

La figure 5.9 montre l'évolution du rayon moyen de sauter (SMR) pour la solution exacte, le modèle d'ordre 1 et le modèle d'ordre 2. La méthode d'ordre 1 a beaucoup de mal à reproduire cette statistique, principalement à cause du fait que cette méthode ne vérifie qu'un seul moment (la masse), alors le SMR est le rapport de deux moments ($M_S^{3/2}/M_S^1$). Même avec 100 sections, le résultat n'est pas satisfaisant. La méthode d'ordre 2 est quant à elle capable de reproduire le SMR dès 10 sections.

La figure 5.10 donne l'erreur globale faite sur la masse totale en fonction du nombre de sections. On remarque que les deux méthodes convergent. La méthode d'ordre 1 vérifie une convergence à l'ordre 1, alors que la méthode d'ordre 2 a une convergence supérieure à 2.

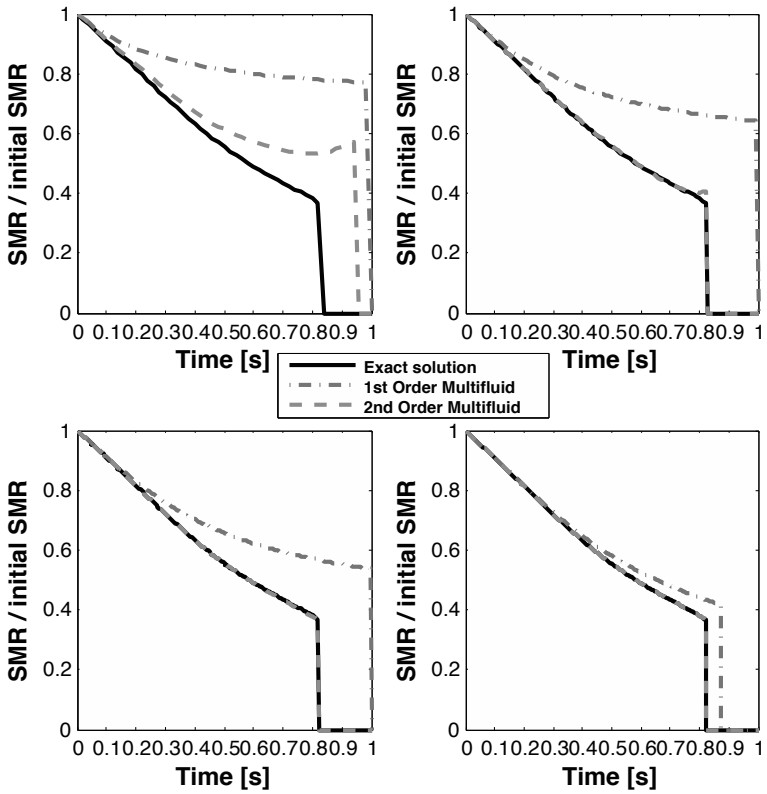


FIGURE 5.9 – Evolution du SMR rapporté au SMR initial pour la solution initiale gaussienne avec 5 (en haut à gauche), 10 (en haut à droite), 20 (en bas à gauche) et 100 (en bas à droite) sections : solution exacte (ligne continue), modèle d'ordre 1 (ligne point-tiretée) et modèle d'ordre 2 (ligne tiretée).

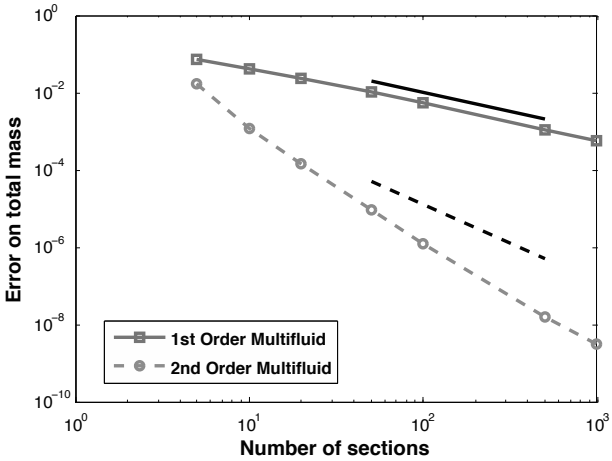


FIGURE 5.10 – Erreur sur la masse totale en fonction du nombre de sections pour la condition initiale gaussienne avec le modèle d'ordre 1 (carrés) et le modèle d'ordre 2 (cercles).

5.2.3 Condition initiale en créneau

Les mêmes diagnostics sont répétés pour l'initialisation en créneau. La figure 5.11 compare la solution initiale à sa représentation initiale avec le modèle d'ordre 1 et le modèle d'ordre 2. Etant constante par morceaux, la méthode d'ordre 1 vérifie de manière exacte la solution initiale. La méthode d'ordre 2 est aussi capable de vérifier cette solution initiale avec une précision très élevée pour tous les nombres de sections.

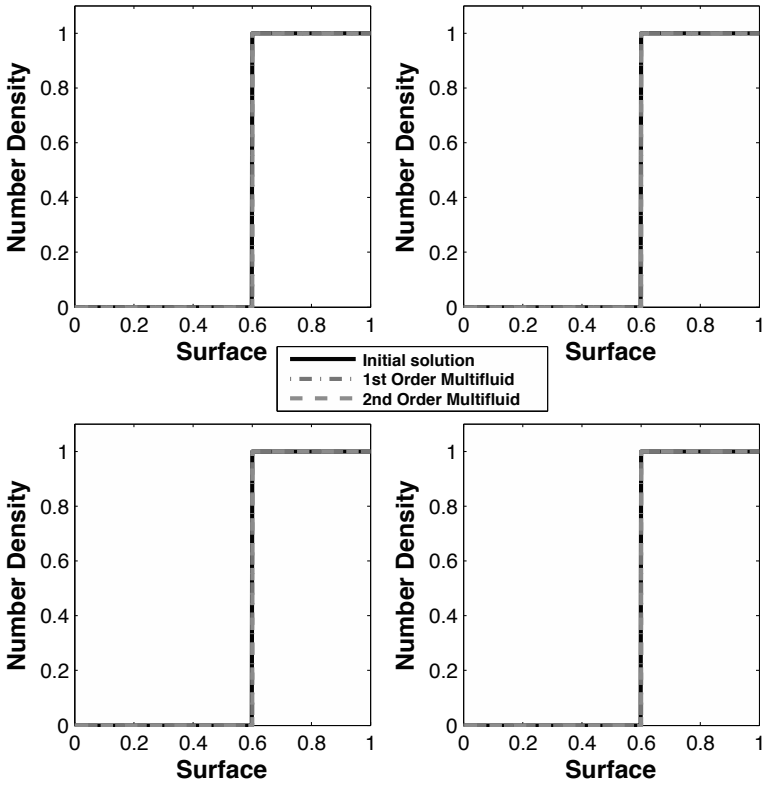


FIGURE 5.11 – Reconstruction initiale de la condition en créneau pour 5 (en haut à gauche), 10 (en haut à droite), 20 (en bas à gauche) et 100 (en bas à droite) sections : solution initiale (ligne continue), modèle d'ordre 1 (ligne point-tiretée) et modèle d'ordre 2 (ligne tiretée).

La figure 5.12 montre l'évolution de la masse totale. Comme pour la solution initiale gaussienne, l'ordre 1 a besoin de beaucoup de sections pour capturer efficacement l'évolution de la masse totale alors que l'ordre 2 est déjà très précis à 5 sections, et sans erreur visible à 10 sections. Cette fois-ci la qualité de la reproduction de la masse totale n'a aucun lien avec la reconstruction initiale, celle-ci étant parfaite pour les deux méthodes.

La figure 5.13 montre l'évolution du SMR. Comme pour la solution gaussienne, la méthode d'ordre 1 ne reproduit pas le SMR, même à 100 sections. Ici, la méthode d'ordre 2 a besoin de beaucoup plus de sections pour être précise, même si les résultats à 10 sections sont déjà satisfaisants. L'erreur n'est plus

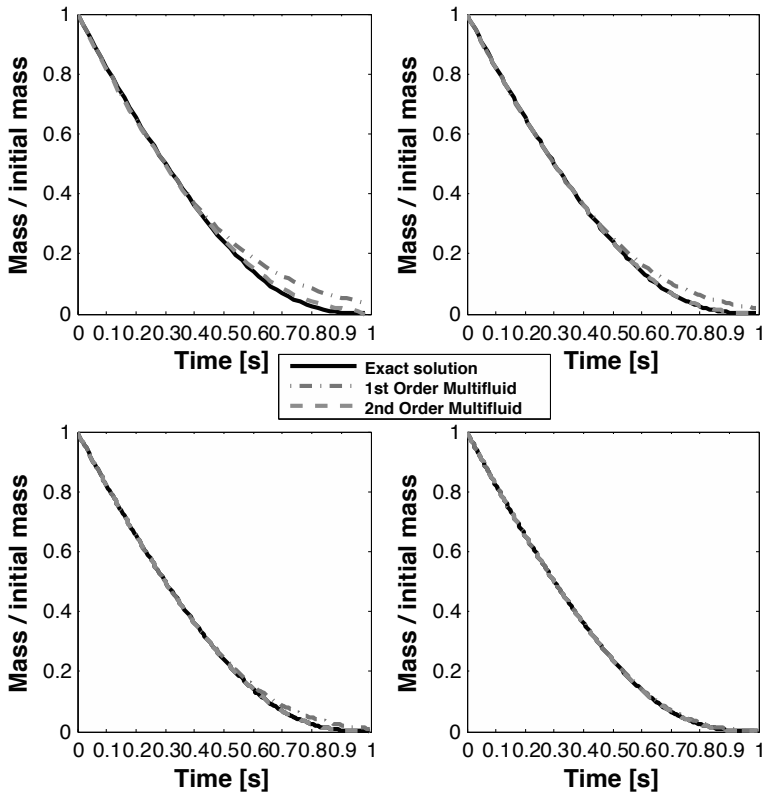


FIGURE 5.12 – Evolution de la masse totale rapportée à la masse initiale pour la solution en créneau avec 5 (en haut à gauche), 10 (en haut à droite), 20 (en bas à gauche) et 100 (en bas à droite) sections : solution exacte (ligne continue), modèle d'ordre 1 (ligne point-tiretée) et modèle d'ordre 2 (ligne tiretée).

discernable qu'à 100 sections.

La figure 5.14 donne l'erreur globale faite sur la masse totale en fonction du nombre de sections. Les deux modèles vérifient bien leurs ordres respectifs. Contrairement au cas avec la condition initiale gaussienne, le modèle d'ordre 2 n'a pas ici un ordre supérieur à 2.

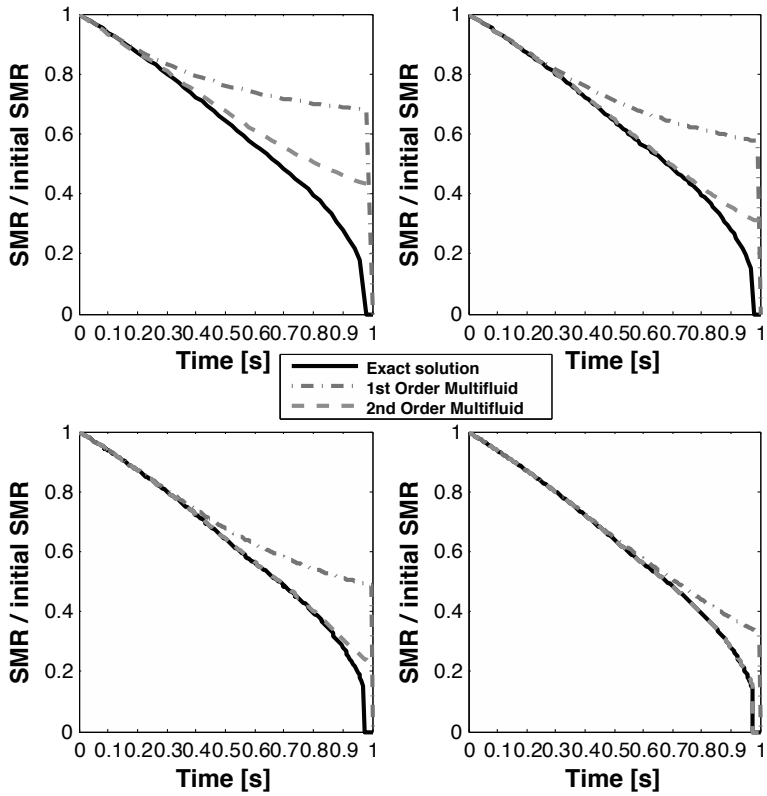


FIGURE 5.13 – Evolution du SMR rapporté au SMR initial pour la solution en créneau avec 5 (en haut à gauche), 10 (en haut à droite), 20 (en bas à gauche) et 100 (en bas à droite) sections : solution exacte (ligne continue), modèle d'ordre 1 (ligne point-tiretée) et modèle d'ordre 2 (ligne tiretée).

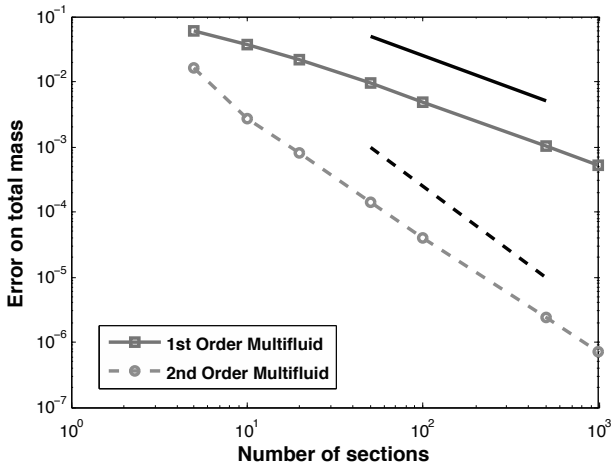


FIGURE 5.14 – Erreur sur la masse totale en fonction du nombre de sections pour la condition initiale en créneau avec le modèle d'ordre 1 (carrés) et le modèle d'ordre 2 (cercles).

5.2.4 Condition initiale bimodale

La condition bimodale est certainement la plus difficile à reproduire en multi-fluide, parce que tout se passe sur une très petite gamme de tailles. La figure 5.15 compare la solution initiale en créneau à sa représentation initiale en modèle d'ordre 1 et en modèle d'ordre 2. Que ce soit pour l'ordre 1 ou l'ordre 2, il faut un nombre vraiment important de sections pour bien reproduire la fdp. Même la méthode d'ordre 2 a beaucoup de mal, et reste à l'ordre 1 pour les faibles nombres de sections.

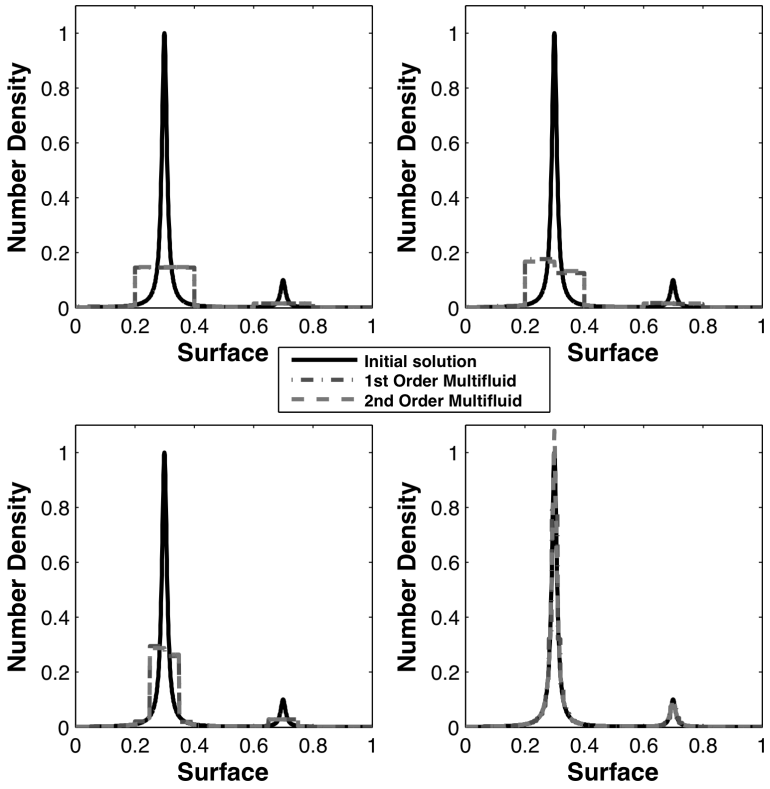


FIGURE 5.15 – Reconstruction initiale de la condition bimodale pour 5 (en haut à gauche), 10 (en haut à droite), 20 (en bas à gauche) et 100 (en bas à droite) sections : solution initiale (ligne continue), modèle d'ordre 1 (ligne point-tiretée) et modèle d'ordre 2 (ligne tiretée).

La figure 5.16 montre l'erreur de reconstruction. Comme observé sur la figure 5.15, la précision ne devient satisfaisante qu'à très grand nombre de sections. Il faut 500 sections à l'ordre 1 pour atteindre une précision de 1% alors qu'il faut 50 sections à la méthode d'ordre 2. On remarque encore que les deux méthodes convergent avec la pente attendue mais seulement pour les très grands nombres de sections.

La figure 5.17 montre l'évolution de la masse totale. Sur ce cas test, les deux méthodes souffrent beaucoup de la difficulté à reproduire en multi-fluide une solution où toute la masse est très localisée. Il faut au moins 20 sections à l'ordre 2 pour être efficace, là où même à 100 sections l'ordre 1 n'est pas parfait.

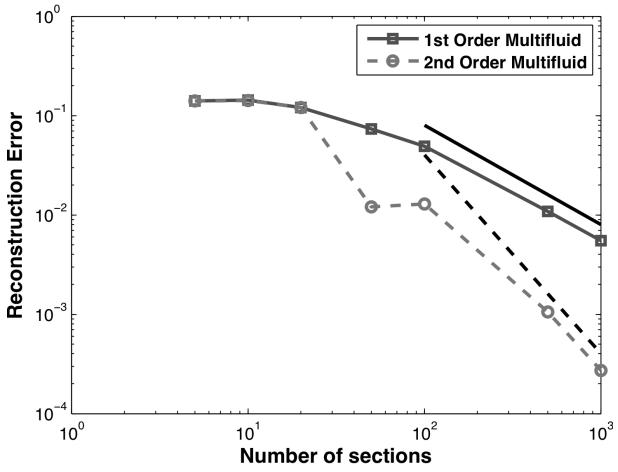


FIGURE 5.16 – Erreur de reconstruction en fonction du nombre de sections pour la condition initiale bi-modale avec le modèle d'ordre 1 (carrés) et le modèle d'ordre 2 (cercles).

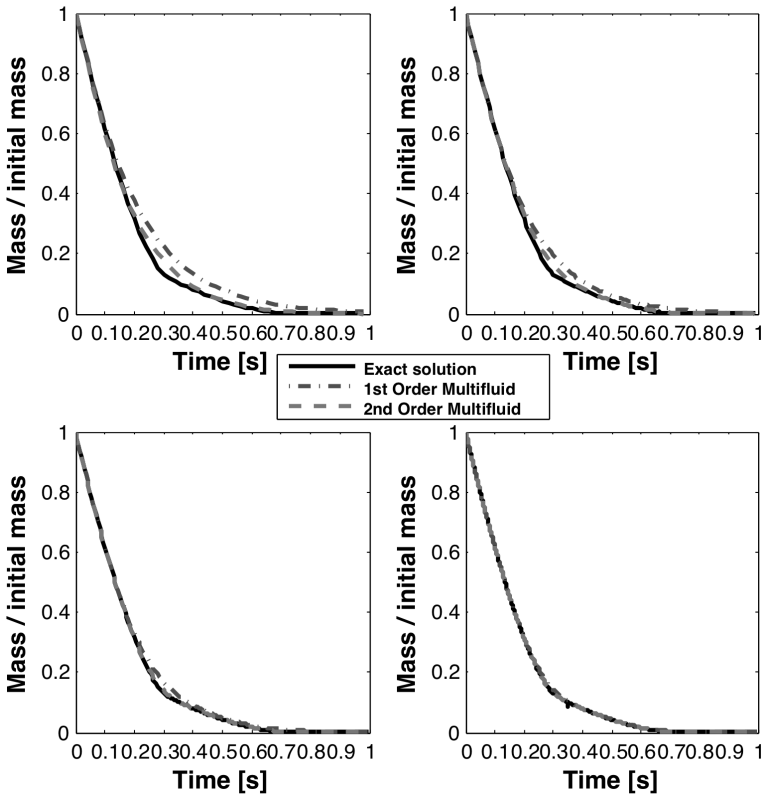


FIGURE 5.17 – Evolution de la masse totale rapportée à la masse initiale pour la solution bimodale avec 5 (en haut à gauche), 10 (en haut à droite), 20 (en bas à gauche) et 100 (en bas à droite) sections : solution exacte (ligne continue), modèle d'ordre 1 (ligne point-tiretée) et modèle d'ordre 2 (ligne tiretée).

Concernant le SMR (figure 5.17), le comportement est assez exotique, en raison du caractère bimodal de la fdp. En effet, quand un pic disparaît, le SMR augmente en raison de la disparition massive et brutale de petites gouttes. On observe ainsi deux remontées du SMR. La méthode d'ordre 1 n'en capture au mieux qu'une, même avec 100 sections. La méthode d'ordre deux a besoin de 20 sections pour commencer à capturer les deux, et reproduit bien le SMR à 100 sections.

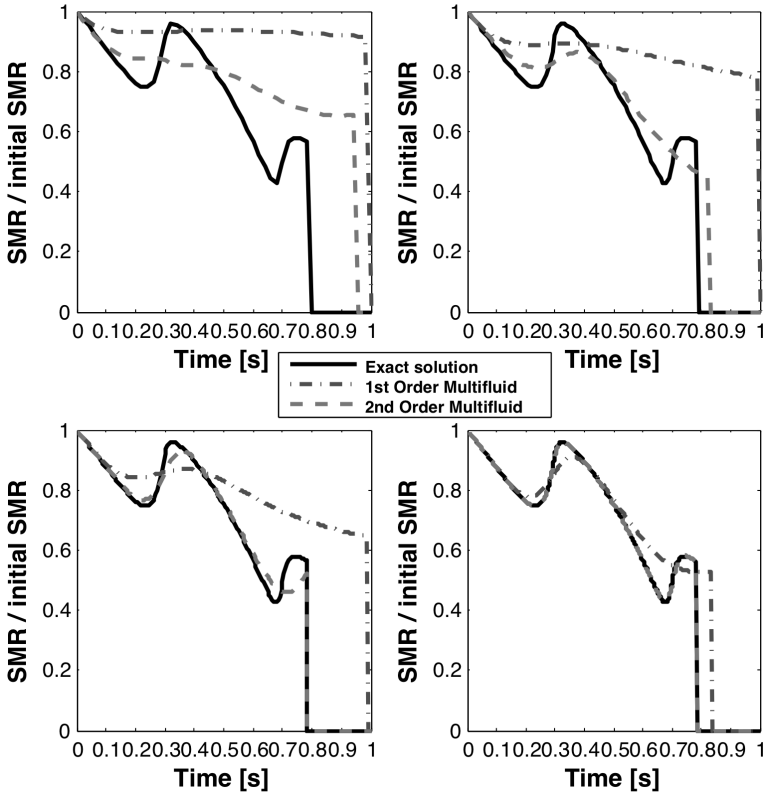


FIGURE 5.18 – Evolution du SMR rapporté au SMR initial pour la solution bimodale avec 5 (en haut à gauche), 10 (en haut à droite), 20 (en bas à gauche) et 100 (en bas à droite) sections : solution exacte (ligne continue), modèle d'ordre 1 (ligne point-tiretée) et modèle d'ordre 2 (ligne tiretée).

Enfin, la figure 5.19 montre l'erreur globale faite sur la masse totale. On remarque que la méthode d'ordre 2 récupère une convergence à l'ordre 2 pour un grand nombre de sections, alors que la méthode d'ordre 1 a finalement un ordre toujours inférieur à 1.

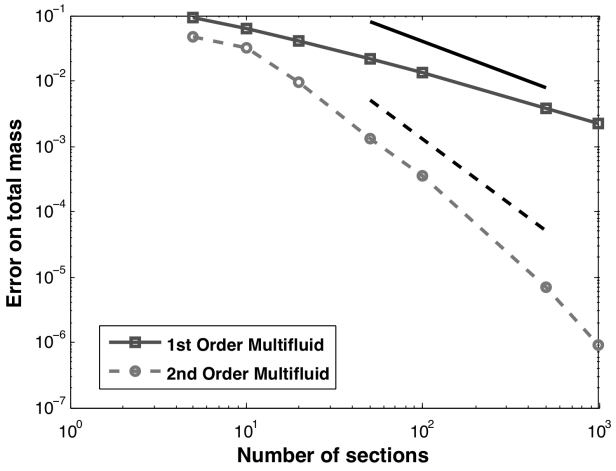


FIGURE 5.19 – Erreur sur la masse totale en fonction du nombre de sections pour la condition initiale bimodale avec le modèle d'ordre 1 (carrés) et le modèle d'ordre 2 (cercles).

Conclusions de la partie II

Une première partie a permis d'évaluer a priori les stratégies numériques existantes pour le diphasique, à savoir d'un côté le schéma PSI, positif et TVD mais très diffusif, et le schéma TTGC couplé à la viscosité artificielle, approche non-TVD mais moins diffusive. L'approche TTGC+viscosité artificielle s'avère être la plus efficace parce qu'elle limite fortement la diffusion numérique. Elle demande cependant d'ajuster des paramètres du senseur de viscosité artificielle pour réduire au maximum la diffusion numérique et traiter efficacement les zones de vide (comme cela est montré pour le cas de la THI dans le chapitre 4). Le schéma PSI a l'avantage non-négligeable de ne pas avoir besoin de viscosité artificielle et peut s'avérer utile dans certains cas.

La deuxième partie a permis de montrer la capacité du FEMM à capturer la dynamique d'un écoulement turbulent à phase liquide dispersée, notamment en terme de concentration préférentielle et d'énergie décorrélée.

Enfin, la dernière partie prend la mesure de la prise en compte des effets polydisperses de traînée et d'évaporation par l'approche multi-fluide. L'approche multi-fluide d'ordre 1 permet de capturer les vitesses pour chaque taille de goutte, ainsi que le comportement général de l'évaporation. Cependant un manque de précision se ressent pour l'évaporation, particulièrement sur le SMR, que le multi-fluide d'ordre 1 surestime grandement à faible nombre de sections. Le multi-fluide d'ordre 2 permet d'obtenir un très bon niveau de précision à faible nombre de sections, et reproduit très bien le SMR.

Troisième partie

Application à la configuration MERCATO

Introduction

La troisième partie de ce manuscrit concerne la simulation de la configuration expérimentale MERCATO [1]. Cette configuration mise en place par R. Lecourt à l'ONERA [2] au Fauga représente une chambre de combustion aéronautique diphasique et dispose de nombreux résultats de diagnostics optiques, provenant de travaux de thèses et de stages dont ceux de Garcia-Rosa [2008] et du projet TIMECOP-AE.

Les résultats les plus récents concernant la modélisation de la configuration MERCATO en diphasique proviennent des thèses de Senoner [2010] et Sanjosé [2009]. Les travaux de Sanjosé [2009] s'intéressaient à la modélisation eulérienne monodisperse de cette configuration (FEM). Les résultats montrent un accord intéressant avec l'expérience pour les vitesses du liquide. Les travaux de Senoner [2010] utilisent la modélisation lagrangienne monodisperse (l'injection se fait à un diamètre unique de $55\mu m$), polydisperse et avec modèle d'atomisation secondaire. La simulation monodisperse a été effectuée pour être comparée au FEM. Dans la simulation polydisperse, les gouttes sont injectées avec la fdp expérimentale à 6mm. Enfin dans le troisième cas, le phénomène d'atomisation secondaire est pris en compte à l'aide du modèle FAST (Gorokhovski [2001]).

Les résultats de Senoner [2010] combinés à ceux de Sanjosé [2009] ont apporté plusieurs conclusions sur les approches de modélisation.

Premièrement, les approches monodisperses (EE ou EL) ne peuvent pas prédire correctement la répartition de liquide et donc de fuel dans la chambre. Cependant, les vitesses sont relativement bien capturées, et proches des vitesses obtenues par l'approche lagrangienne polydisperse. Par contre, une approche polydisperse apparaît capitale pour capturer la répartition du fuel évaporé dans la chambre.

Deuxièmement, la modélisation de l'atomisation secondaire est importante pour reproduire les statistiques de la phase dispersée, et donne des résultats bien meilleurs en comparaison à l'expérience. Le modèle utilisé a cependant nécessité une adaptation des paramètres pour obtenir ces très bons résultats.

Au vu de ces résultats, le travail présent constitue une première étape de la prise en compte de la polydispersion pour le FEM dans AVBP. L'atomisation secondaire n'est pas prise en compte, et demandera des développements supplémentaires. Le set-up des calculs FEM et lagrangien auxquels les résultats du FEMM seront comparés est identique à celui utilisé ici. La seule différence réside dans le maillage, plus fin (3.5 millions de cellules) chez Senoner [2010] et Sanjosé [2009]. Les travaux présentés dans ce chapitre font l'objet d'une publication (Vié et al. [2010a]).

1. Moyen d'Étude et de Recherche en Combustion Aérobie par Techniques Optiques
2. Office National d'Études et de Recherches Aérospatiale

Chapitre 6

Description du banc MERCATO et mise en place du calcul

6.1 Configuration expérimentale

Le banc d'essai MERCATO (figure 6.1) est destiné à l'étude des écoulements diphasiques et à l'allumage en haute altitude, et à la validation des modèles physiques associés. Il est composé de trois parties (figure 6.3) : le plenum, le swirler et la chambre de combustion. De l'air est injecté par le tuyau d'amenée dans le plenum. Au passage dans le swirler, l'écoulement d'air s'accélère et acquiert un mouvement de giration. A la sortie du swirler, l'écoulement gazeux passe par un diffuseur puis entre dans la chambre de combustion de section carrée $13 * 13 cm^2$ et de $28.5 cm$ de longueur. C'est à la sortie du swirler que le système d'injection est placé. Il est composé d'un injecteur pilote Makila DLN modifié conçu par Turbomeca, et d'un gicleur Delavan pour le kérosène liquide.

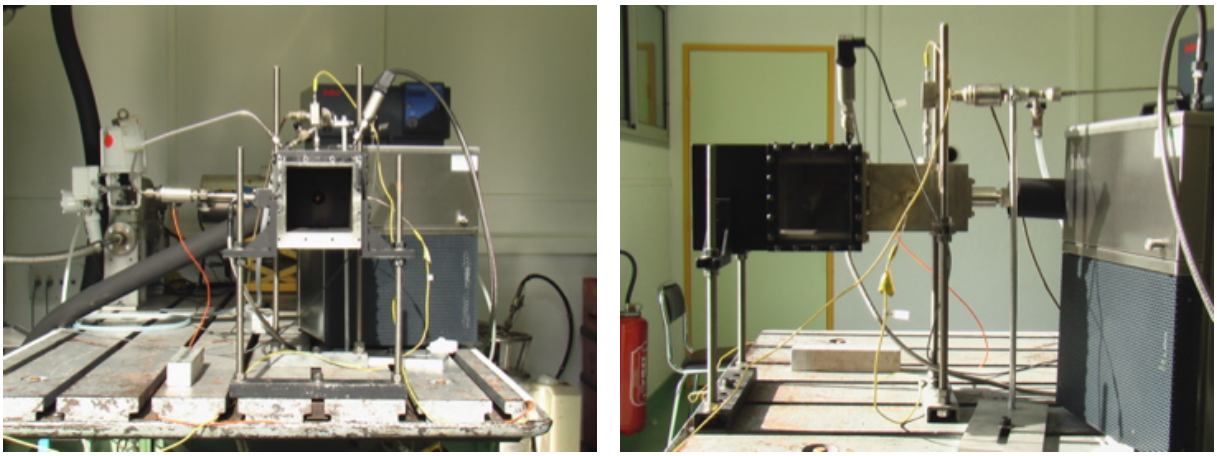


FIGURE 6.1 – Vues du montage expérimental sur le banc Mercato. Crédit photo : Garcia-Rosa [2008].

6.2 Point de fonctionnement et mesures expérimentales

Les travaux de Garcia-Rosa [2008] ont permis de caractériser plusieurs points de fonctionnement de la configuration MERCATO. Ces points sont qualifiés par le débit réduit de l'air W_R et le débit de kérosène. Le débit réduit est défini à partir du débit $\dot{m}_{air}$, de la température T_g et de la pression de l'air P :

$$W_R = \frac{\dot{m}_a \sqrt{T_g}}{P} \tag{6.1}$$

Cette quantité sert à déterminer les conditions de similarité nécessaires pour reproduire à pression atmosphérique des conditions basse pression de haute altitude. Le point de fonctionnement simulé ici est à $T_g = 300K$, $T_l = 300K$, $P = 1atm$, $\dot{m}_a = 15g/s$ et $\dot{m}_l = 1g/s$.

Les mesures expérimentales de Garcia-Rosa [2008] ont été effectuées par une méthode LDA-PDA. Les détails du fonctionnement et de la mise en place de ces mesures est disponible dans Garcia-Rosa [2008]. La LDA (Laser Doppler Anemometry) permet de déterminer la vitesse des particules, là où la PDA (Phase Doppler Anemometry) permet de déterminer la taille des particules. Pour la mesure de la vitesse du gaz, l'écoulement gazeux est ensemencé de gouttes d'huile d'olive dont on mesure la vitesse par LDA. Pour l'écoulement liquide, ce sont les gouttes de kérosène qui sont directement analysées. Les mesures sont effectués sur 5 traversées horizontales et verticales pour l'écoulement gazeux (6, 26, 56, 86 et 116 mm du fond de chambre) et 3 pour l'écoulement diphasique (6, 26 et 56 mm du fond de chambre) (voir figure 6.2).

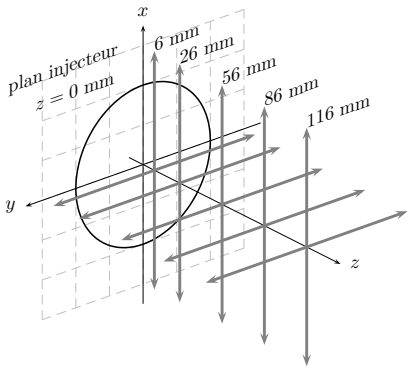


FIGURE 6.2 – Croquis des plans des traversées optiques réalisées.

6.3 Géométrie et maillage

La géométrie complète de la configuration est prise en compte (figure 6.3). L'atmosphère est ici modélisée par une boite de grande dimension, pour ne pas perturber la sortie de la chambre de combustion. Le maillage utilisé est présenté figure 6.4. Il est composé de 1351767 cellules avec un volume minimal

de $6.13 \times 10^{-12} m^3$. On remarque que la partie modélisant l'atmosphère est très faiblement maillée par rapport à la chambre. Sur la figure 6.5 sont indiquées les positions des mesures de profils qui seront comparés à l'expérience. Le maillage est très raffiné en sortie du swirler, et se déraffine progressivement vers l'aval de la chambre de combustion.

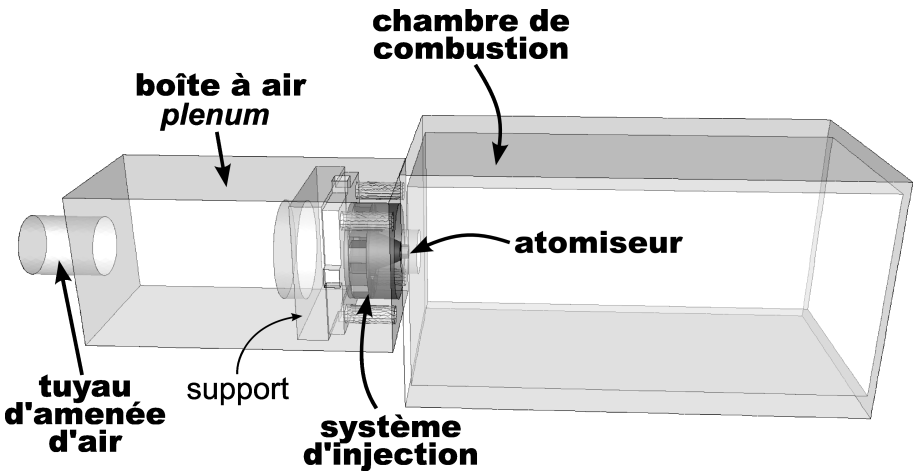


FIGURE 6.3 – Configuration de calcul de la chambre de combustion Mercato.

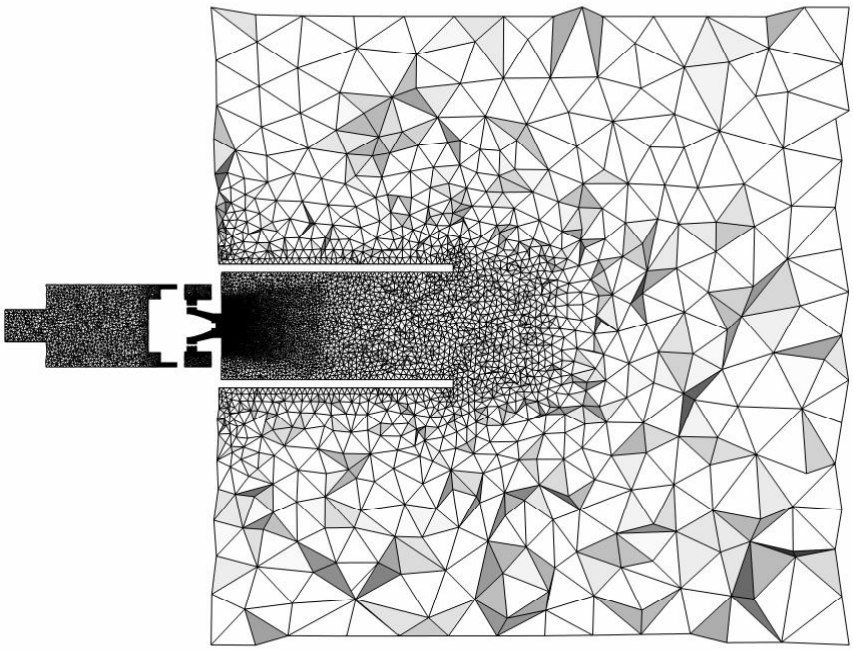


FIGURE 6.4 – Coupe longitudinale du maillage.

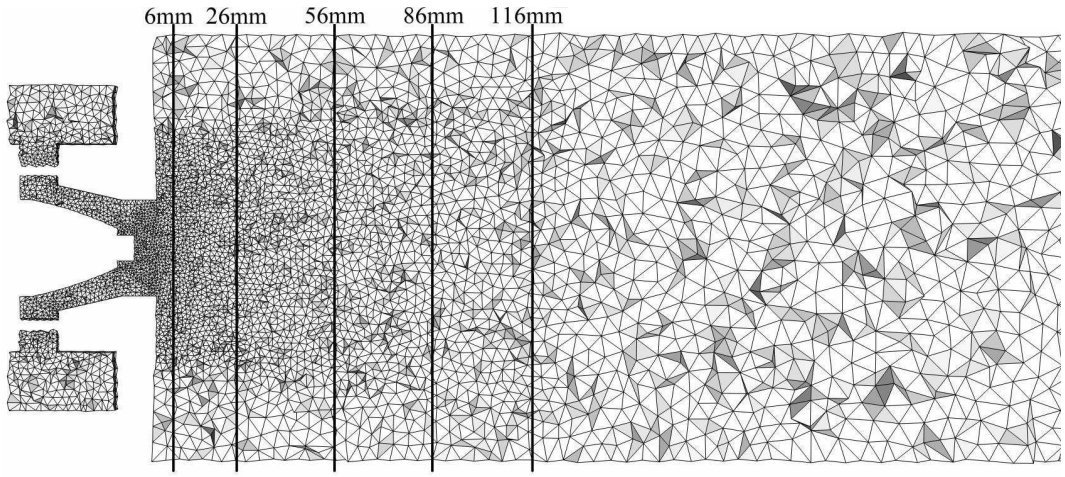


FIGURE 6.5 – Coupe longitudinale du maillage avec les positions des plans de mesure.

6.4 Conditions aux limites

Les conditions limites utilisées pour la simulation de cette configuration sont données tableau 6.1 pour la phase gazeuse et tableau 6.2 pour le liquide. Les conditions limites d'injection et de sortie de la phase gazeuse sont de type NSCBC [1](Poinsot and Lele [1992]), et des lois de parois sont utilisées pour modéliser le cisaillement à la paroi (Jaegle [2009]). Un co-courant léger est appliqué dans la partie modélisant l'atmosphère, afin de la renouveler progressivement. La condition d'injection liquide est détaillée dans la section 6.6. Les parois sont non-adhérantes (seule la composante normale est annulée). Un co-courant léger est aussi appliqué dans la partie atmosphère.

6.5 Paramètres numériques

Les simulations sont réalisées à avec les paramètres numériques suivants :

- Schéma TTGC,
- Modèle WALE pour la LES,
- CFL=1.0,
- Viscosité artificielle du gaz : senseur Colin avec $\varepsilon^{(4)} = 0.01$ et $\varepsilon^{(2)} = 0.05$,
- Viscosité artificielle du liquide : senseur CM5 avec $\varepsilon^{(4)} = 0.001$ et $\varepsilon^{(2)} = 0.20$,
- Limitation du nombre de gouttes : $n^{(p)}_{l,mini} = 10^5$,
- Limitations du RUE : $\delta\Theta^{(p)}_{l,mini} = 0$ et $\delta\Theta^{(p)}_{l,maxi} = 50\%$ de l'énergie cinétique du gaz.

La méthodologie associée à ce jeu de paramètres a été initialement proposée par Martinez [2010]. Elle a déjà fait des preuves aussi bien sur d'autres configurations (injection diesel (Martinez [2010]), in-

1. Navier-Stokes Characteristic Boundary Conditions

Nom	**Type**	**Paramètres physiques**	
Tuyau d'amenée	NSCBC	Température	$T_g = 463$ K
		Débit massique	$\dot{m}_a = 15.0$ g/s
		Composition	air pur
Co-courant	NSCBC	Température	$T_g = 463$ K
		Vitesse débitante	$U_{\text{bulk}} = 0.15$ m/s
		Composition	air pur
Atomiseur **Cas monophasique**	Paroi	Adhérente	
		Adiabatique	
Atomiseur **Cas diphasique**	Air entraîné NSCBC	Température	$T_g = 463$ K
		Vitesse débitante	$U_{\text{bulk}} = 1.3 \times 10^{-3}$ m/s
		Composition	air pur
Parois : plenum tourbillonneur chambre	Paroi	Adhérente	
		Adiabatique	
		Loi de paroi	
Parois latérales atmosphère	Paroi	Glissante	
		Adiabatique	
Sortie	NSCBC	Pression	$P = 1$ atm

TABLE 6.1 – Conditions aux limites pour la phase gazeuse.

Nom	**Type**	**Paramètres physiques**	
Tuyau d'amenée	Dirichlet	Température	$T_l = 300$ K
		Densité de gouttes par section	$n_l = 1 \times 10^5$
		Vitesse débitante	$U_{l,\text{bulk}} = 22$ m/s
Co-Courant	Dirichlet	Température	$T_l = 300$ K
		Densité de gouttes par section	$n_l = 1 \times 10^5$
		Vitesse débitante	$U_{l,\text{bulk}} = 0.15$ m/s
Atomiseur	Injection Dirichlet	Température	$T_l = 300$ K
		Débit liquide	$\dot{m}_l = 1$ g/s
Parois	Paroi	Glissante	
Sortie	Dirichlet		

TABLE 6.2 – Conditions aux limites pour la phase liquide.

jection essence (Vié and Habchi [2008])) que sur la configuration MERCATO en monodisperse (Sanjosé [2009]).

6.6 Composition du kérosène et modèle d'injection FIMUR

Le carburant utilisé pour la simulation de MERCATO est un modèle de kérosène (ou surrogate) correspondant au mélange utilisé par Luche [2003] (tableau 6.3). Les propriétés de ce kérosène sous forme liquide sont données dans le tableau 6.4. Plus de détails sont disponibles dans Sanjosé [2009].

Nom du Composé	Formule	Fraction Massique	Masse Molaire [g/mol]
Decane	$NC_{10}H_{22}$	0.767	142.284
Propylbenzene	PHC_3H_7	0.132	120.194
Propylcyclohexane	CYC_9H_{18}	0.101	126.241
KERO_LUCHE	$C_{9.73957}H_{20.0542}$	1	137.195

TABLE 6.3 – Définition du *surrogate* du kérosene par Luche [2003].

T_b @ **1 atm (K)**	ρ_l **@300 K (kg/m^3)**	$C_{p,l}$ **@ 300 K (J/kg/K)**	L_{vap} **@ 300 K(J/kg)**
445.1	781	2.003×10^3	289.01×10^3

TABLE 6.4 – Propriétés du surrogate KERO_LUCHE sous forme liquide : T_b est la température d'ébullition, ρ_l la densité, $C_{p,l}$ la capacité calorifique, et L_{vap} la chaleur latente de vaporisation du liquide.

Les injecteurs de carburant sont des systèmes au fonctionnement et à la géométrie complexes, difficiles à simuler dans un calcul LES, en particulier l'atomisation primaire. On utilise donc des modèles simplifiés, tels que le modèle FIMUR (Senoner et al. [2009a]). Le modèle FIMUR fournit des conditions aux limites pour les calculs lagrangiens et eulériens. Les conditions limites sont alors directement appliquées sur la face d'injection de l'atomiseur.

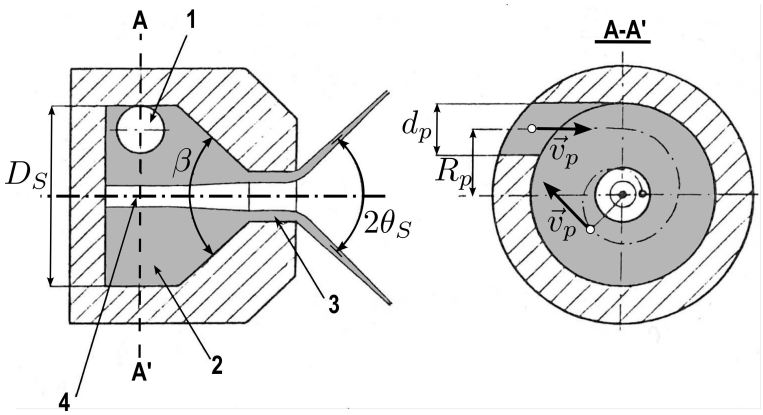


FIGURE 6.6 – Schéma d'un atomiseur de type simplex.

Rayon de décharge	$R_0 = 0.25$ mm
Demi-angle de spray	$\theta_S = 40°$
Pression d'injection	$\Delta P_i = 6.89 \times 10^5$ Pa
Débit de calibration	$\dot{m}_l^c = 3.3$ g/s
Rayon de la surface d'injection	$R_i = 4$ mm
Diamètre moyen des gouttes	$d_{10} = 55$ μm

TABLE 6.5 – Paramètres décrivant l'atomiseur liquide.

L'orifice de l'injecteur et l'épaisseur de la nappe étant très faibles, il serait très coûteux de les mailler directement. On décale alors la condition d'injection en aval de l'orifice, comme proposé par Martinez et al. [2010] et Sanjosé [2009], après que la nappe se soit fragmentée et dispersée, formant un spray d'extension plus large que l'orifice d'injection (figure 6.6). La reconstruction des profils se fait en 2 étapes : d'abord les profils à l'orifice sont établis puis avec l'hypothèse d'auto-similarité et le calcul de l'entraînement d'air, les profils sont reconstruits sur le plan d'injection décalé. Les détails du développement du modèle sont disponibles dans Senoner et al. [2009a].

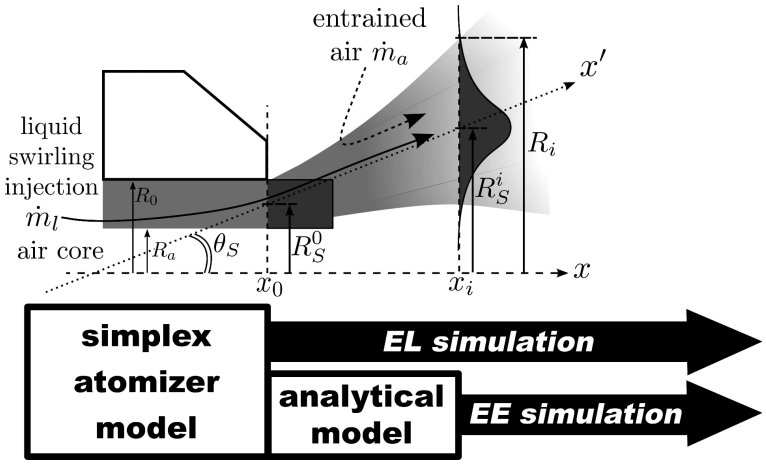


FIGURE 6.7 – Schématisation des étapes du modèle FIMUR : caractérisation du liquide en sortie de l'injecteur (pour une simulation lagrangienne) et sur un plan en aval de l'injecteur (pour une simulation eulérienne).

Le modèle initial proposé par Sanjosé [2009] est monodisperse. La polydispersion modifie les effets de traînée et donc d'entraînement d'air. Cependant, dans une première approche, on se limitera à distribuer la masse de liquide prédite par le modèle en respectant la fdp dans le spray. L'injection pour les simulations lagrangiennes polydisperses de Senoner [2010] a été faite de la même manière (à ceci près que le diamètre des particules injectées est choisi par un tirage aléatoire). Le modèle monodisperse détermine trois conditions limites sur le plan d'injection décalé pour la phase liquide : la masse m_l, la vitesse

$U_{l,i}$ et et le diamètre moyen d_l. Pour distribuer cette condition selon la fdp expérimentale (figure 6.8), on découpe l'espace des tailles en 10 sections constantes en diamètre. Le diamètre maximum choisi est de $150\mu m$, diamètre pour lequel les fdp cumulées expérimentales sont proches de 100%. On reconstruit alors la densité de probabilité de chaque section en intégrant la fdp expérimentale sur les sections (figure 6.8) :

$$f_{nombre}^{(p)} = \int_{S_p}^{S_{p+1}} f_{exp}(S)dS \tag{6.2}$$

On calcule ainsi la densité de masse de chaque section :

$$f_{masse}^{(p)} = f_{nombre}^{(p)} \cdot \frac{\rho_l}{24\sqrt{\pi}} \frac{(S_{p+1}^2 - S_p^2)}{(S_{p+1}^{0.5} - S_p^{0.5})} \tag{6.3}$$

On applique finalement cette fdp à la masse totale prédite pour le modèle monodisperse :

$$m_l^{(p)} = f_{masse}^{(p)} . m_l \tag{6.4}$$

La vitesse de chaque section est égale à la vitesse monodisperse, de sorte que la quantité de mouvement prédite pour l'injection multi-fluide est identique à celle prédite pour l'injection monodisperse :

$$U_{l,i}^{(p)} = U_{l,i} \tag{6.5}$$

$$\sum U_{l,i}^{(p)} m_l^{(p)} = U_{l,i} \sum m_l^{(p)} = U_{l,i} m_l \tag{6.6}$$

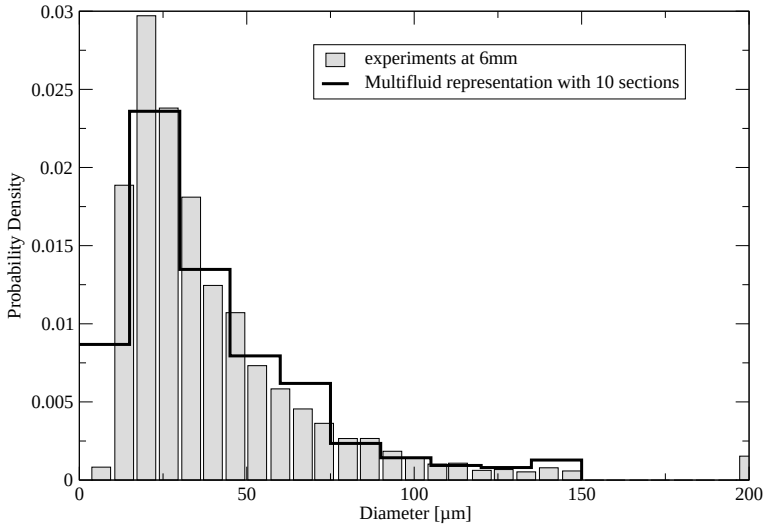


FIGURE 6.8 – Fdp en fonction du diamètre : expérience à 6mm du fond de chambre (histogramme) et condition limite d'injection pour le calcul FEMM 10 sections (ligne continue).

Chapitre 7

Calcul monophasique

L'écoulement monophasique de MERCATO a déjà été étudié dans les travaux de Lamarque [2007], Roux [2009], Sanjosé [2009] et Senoner [2010]. Les influences des schémas numériques, des modèles LES, et des maillages ont été caractérisées, et le calcul réalisé ici utilise la méthodologie optimale issue des précédents travaux. Les résultats monophasiques de ce chapitre illustrent la topologie de l'écoulement qui conditionne la phase liquide, et valident la simulation en comparaison avec les mesures.

7.1 Conditions du calcul

Le calcul est ici uniquement monophasique. Les paramètres numériques et les conditions limites utilisées sont celles décrites dans le chapitre 6. La condition initiale est un écoulement au repos (vitesse nulle, $T_g = 300$K). Le calcul est effectué pendant 200ms pour atteindre un état stationnaire. Les moyennes sont ensuite calculées sur 800 ms.

7.2 Topologie de l'écoulement

La figure 7.1 montre le champ de vitesse axiale de la phase gazeuse. La vitesse axiale permet de bien caractériser la topologie caractéristique de ce type d'écoulement, les iso-contours de vitesse axiale nulle matérialisent les zones de recirculation. On remarque une zone de recirculation centrale et des zones de recirculation dans les coins en sortie du swirler. Ces deux structures sont caractéristiques de ce type de configuration, et la prédiction de leurs positions permet de qualifier la précision de la modélisation.

On s'intéresse sur la figure 7.2 à la modélisation de sous-maille du modèle LES, avec le ratio de la viscosité turbulente et de la viscosité laminaire. On remarque que la viscosité turbulente est relativement forte dans la zone de cisaillement, ce qui démontre l'importance de la modélisation LES. Le caractère turbulent de l'écoulement est d'ailleurs confirmé par les figures 7.3 et 7.4, où les énergies cinétique

moyenne E_{kin} et turbulente E_{turb} sont calculées comme suit :

$$E_{kin} = \frac{1}{2}\left(< U_{g,1} >^2 + < U_{g,2} >^2 + < U_{g,3} >^2\right) \tag{7.1}$$

$$E_{turb} = \frac{1}{2}\left(< U_{g,1}^{RMS} >^2 + < U_{g,2}^{RMS} >^2 + < U_{g,3}^{RMS} >^2\right) \tag{7.2}$$

avec :

$$U_{g,i}^{RMS} = \sqrt{(< U_{g,i}^2 > - < U_{g,i} >^2} \tag{7.3}$$

On remarque que les niveaux d'énergie cinétique moyenne et turbulente sont du même ordre de grandeur, indiquant une très forte turbulence résolue.

Connaissant la topologie de l'écoulement gazeux, on peut s'attendre à une topologie similaire pour l'écoulement liquide, ce dernier étant conditionné par la traînée. On s'attendra donc à retrouver les deux zones de recirculation sur l'écoulement liquide. De plus, le jet gazeux impactant sur la paroi, on pourra s'attendre aussi à ce que le jet liquide fasse de même, si il ne s'est pas totalement évaporé avant de toucher la paroi. Les niveaux de turbulence devront aussi être ressentis, même si la traînée a pour effet d'atténuer ces fluctuations pour des particules inertielles.

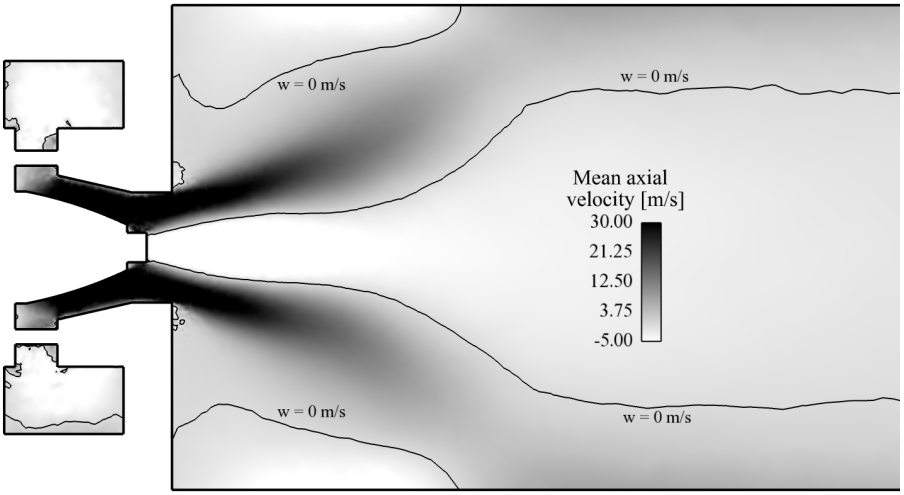


FIGURE 7.1 – Coupe longitudinale de vitesse axiale moyenne de la phase gazeuse. Les isocontours à vitesse axiale nulle représentent la position des zones des recirculation.

7.3 Validation

Le calcul est validé par comparaison avec les mesures. La vitesse moyenne axiale de la phase gazeuse, aux 5 traversées à 6, 26, 56, 86 et 116 mm du fond de chambre, est comparée aux mesures sur la figure 7.5. Cette vitesse est bien reproduite sur les deux premiers plans (à 6 et 26 mm). A 56 mm, le maximum est sous-estimé, et sa position légèrement décalée. A 86 mm, la vitesse est mal reproduite, prédisant une

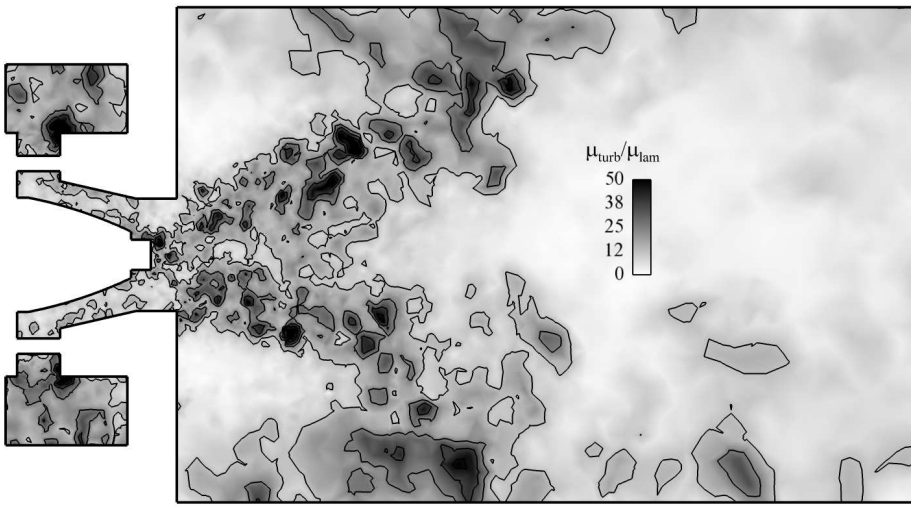


FIGURE 7.2 – Coupe longitudinale du rapport entre la viscosité turbulente et la viscosité laminaire pour une solution instantanée de la phase gazeuse.

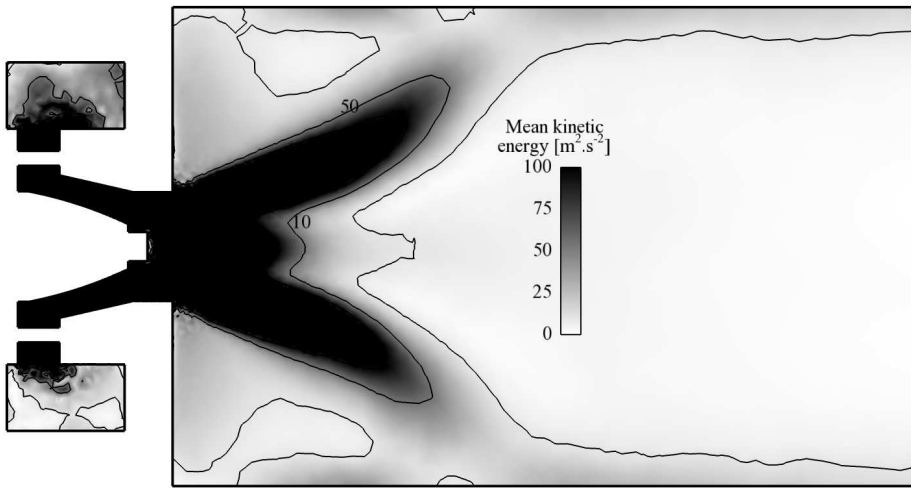


FIGURE 7.3 – Coupe longitudinale d'énergie cinétique moyenne résolue de la phase gazeuse.

mauvaise position de la zone de recirculation de coin (expérimentalement à environ 60 mm de l'axe, alors que le calcul ne la prédit plus sur cette traversée). A 116 mm, le profil de vitesse est de nouveau en bon accord avec l'expérience. Sanjosé [2009] explique que le décalage de la position de la zone de recirculation est faible (5 mm environ), et qu'il est dû à l'éclatement tourbillonnaire résultant de l'interaction de la turbulence du jet libre avec la turbulence proche paroi, et qu'il est donc fortement influencé par les méthodes numériques, la discrétisation proche paroi et le modèle LES.

La figure 7.6 montre un bon accord entre l'expérience et le calcul pour la vitesse moyenne radiale.

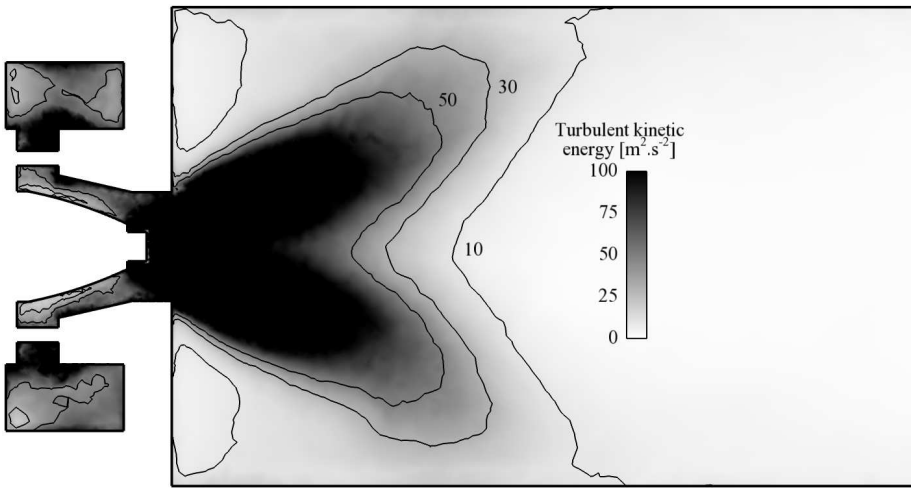


FIGURE 7.4 – Coupe longitudinale d'énergie cinétique turbulente résolue de la phase gazeuse.

Le calcul ne présente cependant pas la dissymétrie des profils expérimentaux, dûe à la présence du mât d'injection dans le plenum, non pris en compte dans le calcul. Enfin, la figure 7.7 montre la comparaison pour la vitesse axiale avec des conclusions similaires.

On s'intéresse maintenant aux fluctuations des vitesses, quantité plus difficiles à capturer. Les Figs.7.8, 7.9 et 7.10 comparent les RMS de vitesse axiale, radiale et orthoradiale respectivement. On remarque que la forme des profils est bien reproduite pour toutes les traversées, mais les valeurs sont sous-estimées. Les deux premiers profils sont particulièrement bien capturés. Il ne faut pas oublier que les profils numériques ne reportent ici que la RMS résolue, et que la partie sous-maille est manquante, ce qui peut expliquer les RMS plus faibles. De plus le maillage est significativement déraffiné après 26 mm, résultant en une moins bonne prédiction.

7.4 Conclusions sur la modélisation de l'écoulement gazeux

Les résultats de simulation pour la phase gazeuse sont globalement satisfaisants. Sanjosé [2009] a réalisé des calculs sur maillages plus fins avec la même méthodologie, et a obtenu des résultats meilleurs, ce qui valide la méthodologie. Un phénomène reste difficile à capturer : l'éclatement tourbillonnaire à 86 mm qui, s'il est à peine décalé, résulte en une différence importante des profils de vitesse à cette position.

Néanmoins les résultats obtenus sur ce maillage relativement grossier sont suffisants pour mettre en oe uvre le modèle multi-fluide.

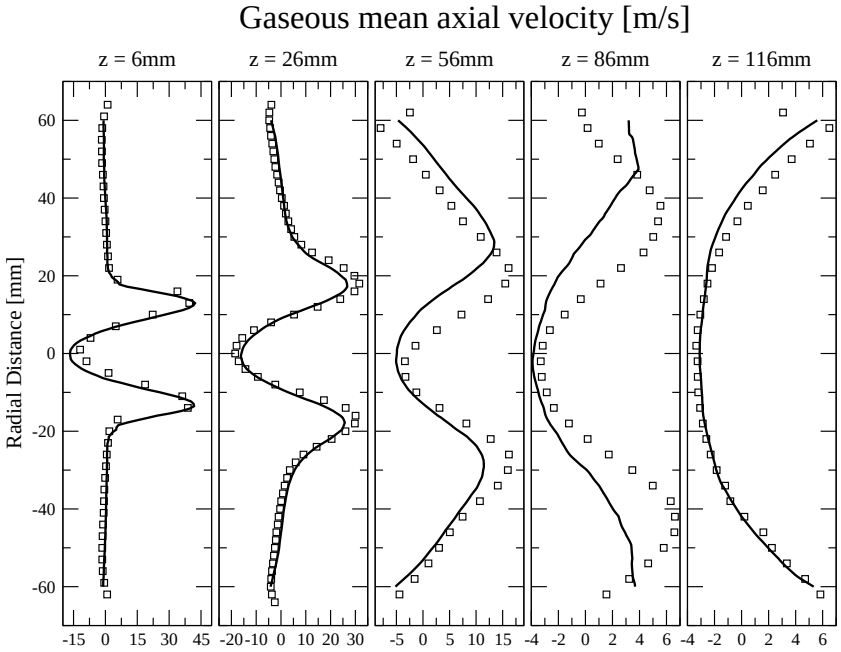


FIGURE 7.5 – Vitesse moyenne axiale de la phase gazeuse à 6, 26, 56, 86 et 116 mm du fond de chambre : expérience (carrés) et simulation (ligne continue).

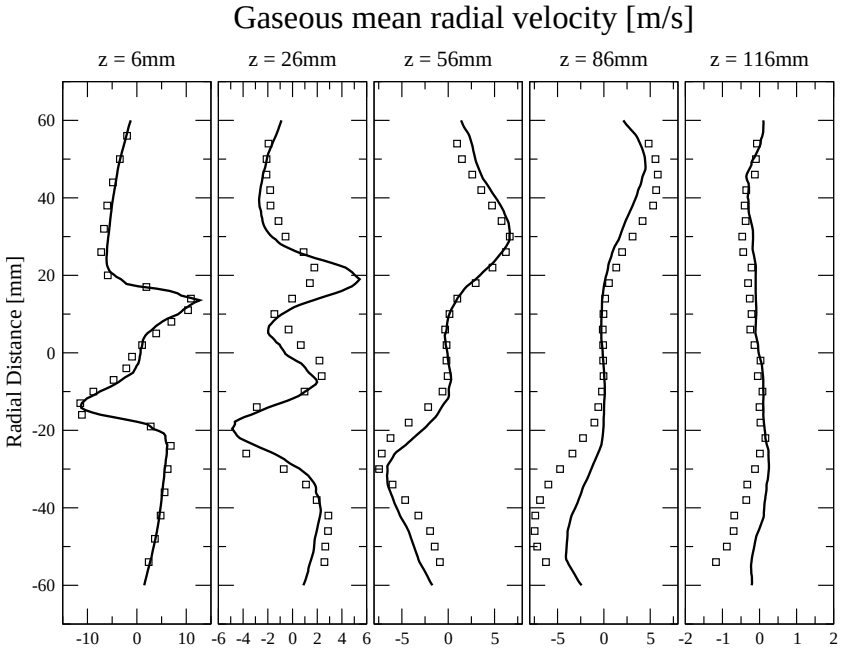


FIGURE 7.6 – Vitesse moyenne radiale de la phase gazeuse à 6, 26, 56, 86 et 116 mm du fond de chambre : expérience (carrés) et simulation (ligne continue).

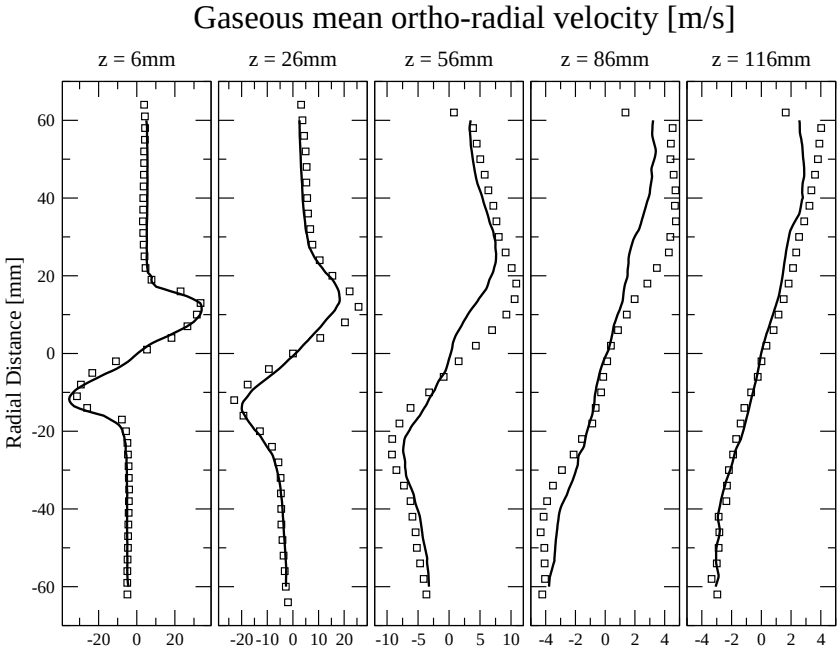


FIGURE 7.7 – Vitesse moyenne orthoradiale de la phase gazeuse à 6, 26, 56, 86 et 116 mm du fond de chambre : expérience (carrés) et simulation (ligne continue).

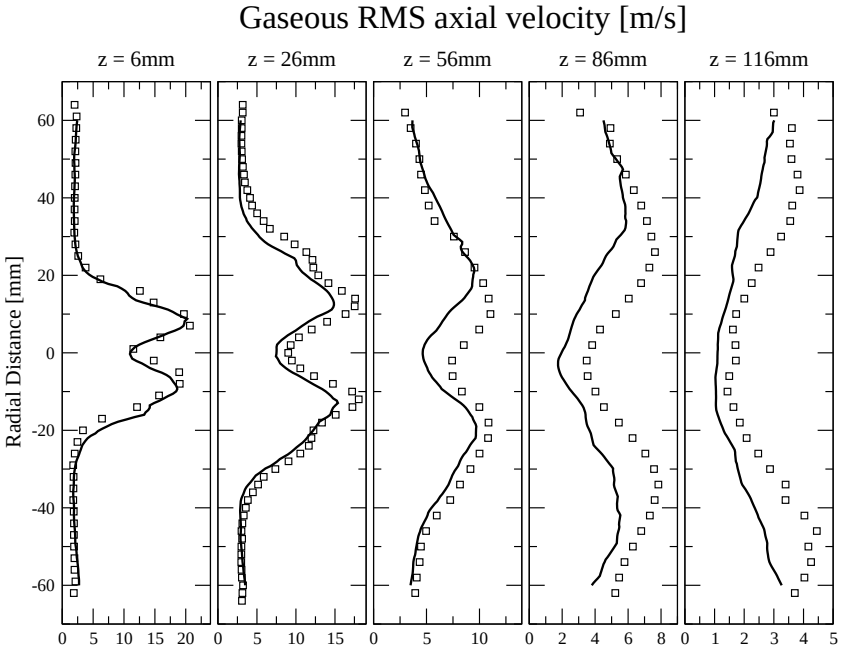


FIGURE 7.8 – RMS de vitesse axiale de la phase gazeuse à 6, 26, 56, 86 et 116 mm du fond de chambre : expérience (carrés) et simulation (ligne continue).

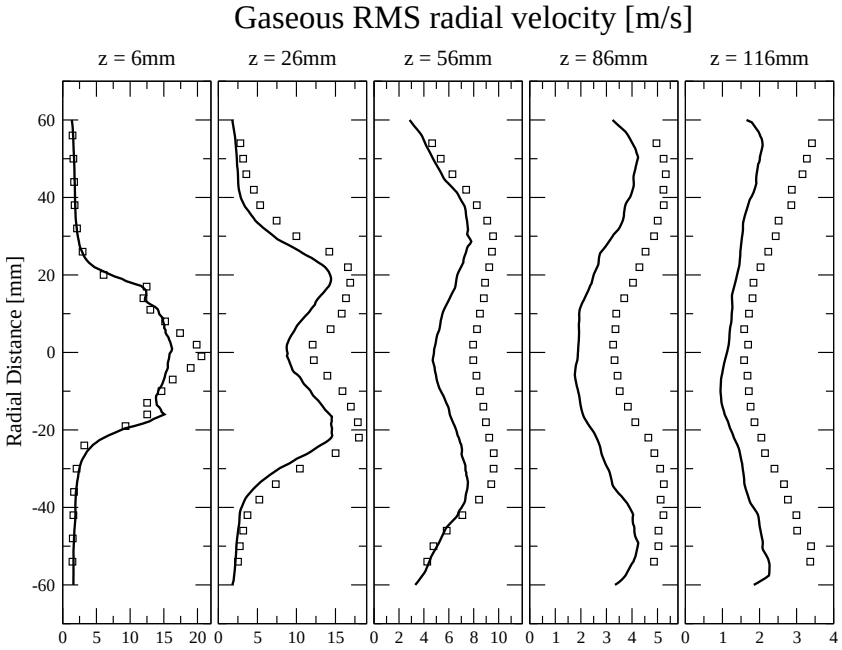


FIGURE 7.9 – RMS de vitesse radiale de la phase gazeuse à 6, 26, 56, 86 et 116 mm du fond de chambre : expérience (carrés) et simulation (ligne continue).

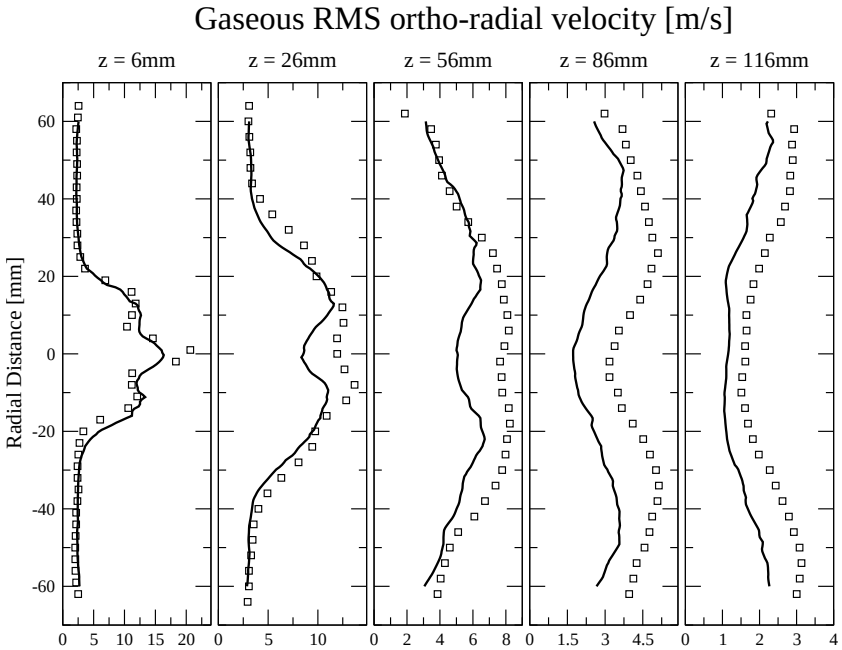


FIGURE 7.10 – RMS de vitesse orthoradiale de la phase gazeuse à 6, 26, 56, 86 et 116 mm du fond de chambre : expérience (carrés) et simulation (ligne continue).

Chapitre 8

Calcul diphasique

8.1 Remarques préliminaires sur le comportement du multi-fluide

Le comportement d'un modèle multi-fluide est différent du modèle eulérien monodisperse ou lagrangien, parce ce que les quantités transportées ne sont pas les mêmes.

En effet la division en section de l'espace des tailles fait que, par rapport à un calcul eulérien monodisperse, on transporte plusieurs "phases liquides". Chacune possède ses propres variables (vitesse, RUE, masse, nombre de gouttes et enthalpie).

Comparativement à un calcul lagrangien, les résultats doivent aussi être interprétés différemment. Alors qu'en lagrangien, les gouttes évoluent indépendamment les unes des autres (à part lors des collisions), les sections du multi-fluide évoluent séparément dans l'espace physique (vitesses et RUE notamment), mais sont couplées par les termes d'évaporation.

La notion de trajectoire est donc bien différente en multi-fluide, en lagrangien et en eulérien monodisperse. En multi-fluide, une goutte se déplace non seulement dans l'espace physique, mais aussi dans l'espace des tailles. Il faut donc voir les champs de vitesses de chaque phase comme ceux de la goutte tant que sa taille est comprise dans l'intervalle de taille de la section.

8.2 Conditions du calcul

Les paramètres numériques et les conditions limites utilisées sont celles décrites dans le chapitre 6. La condition initiale est un résultat d'un calcul FEM monodisperse, pour lequel la masse a été partagée également entre les sections. Lorsque l'état stationnaire est atteint, les moyennes sont calculées sur 200 ms.

8.3 Analyse de l'écoulement multi-fluide

8.3.1 Phase liquide totale

La phase liquide totale est définie comme la somme des différentes sections :

$$m_l^{tot} = \sum_{p=1}^{N} m_l^{(p)} \tag{8.1}$$

$$n_l^{tot} = \sum_{p=1}^{N} n_l^{(p)} \tag{8.2}$$

$$U_{l,i}^{tot} = \frac{\sum_{p=1}^{N} n_l^{(p)} U_{l,i}^{(p)}}{n_l^{tot}} \tag{8.3}$$

$$\delta\Theta_l^{tot} = \frac{\sum_{p=1}^{N} n_l^{(p)} \delta\Theta_l^{(p)}}{n_l^{tot}} \tag{8.4}$$

$$D_{10} = \frac{\sum_{p=1}^{N} n_l^{(p)} d^{(p)}}{n_l^{tot}} \tag{8.5}$$

Pour des comparaisons avec les résultats PDA, les vitesses et l'énergie décorrélée de la phase totale sont obtenues par une moyenne pondérée par le nombre de gouttes.

La figure 8.1 montre les champs moyens de fraction volumique, de nombre de gouttes, de température et de diamètre moyen (D_{10}) de la phase liquide totale. Le champ de fraction volumique indique clairement que le liquide persiste dans toute la chambre de combustion et, comme dans les expérimentations, impacte les parois de la chambre. Il y a très peu de gouttes dans les zones de recirculation de la phase gazeuse (zone centrale et zones de coin), ce qui est logique vu que les gouttes sont éjectées des zones de forte vorticité. La corrélation entre le champ de densité en nombre de gouttes et le champ de fraction volumique est intéressante. En effet, il existe des zones avec beaucoup de gouttes, mais une faible fraction volumique, et inversement. Cela permet de situer les zones d'accumulation de petites gouttes et de grosses gouttes. En aval de l'écoulement, proche de la sortie de la chambre, la fraction volumique est non négligeable, mais le nombre de gouttes est faible. Les grosses gouttes, faiblement influencées par le gaz et n'ayant pas eu le temps de s'évaporer, sont seules à atteindre cette zone. A contrario juste à la sortie du swirler près des parois de la chambre, on remarque une accumulation de gouttes, avec une fraction volumique très modérée. Ce sont ici les petites gouttes, très fortement influencées par le gaz qui se sont accumulées sur la paroi. Cette accumulation est certes qualitativement correcte (un film liquide est observé dans l'expérience), mais reste mal modélisé par la méthode qui ne permet pas de calculer le rebond des gouttes aux parois. Cela conduit à une surestimation de l'accumulation de gouttes sur les parois.

Le champ de température liquide montre que le temps de chauffage de la phase liquide est très long.

En effet, la phase liquide totale n'atteint la température wet-bulb [1] que loin en aval de l'injection. Cela est dû aux différences des temps de chauffage de chaque section. Les petites gouttes chauffent et s'évaporent beaucoup plus vite que les grosses. Elles disparaissent donc très vite, et il ne reste que les gouttes qui n'ont pas eu le temps d'atteindre leur température maximale et de s'évaporer.

Le champ de diamètre moyen de la phase totale confirme les observations faites plus haut. On observe bien la présence des grosses gouttes en aval de l'écoulement, là où les petites gouttes sont plutôt en amont. On observe aussi la présence de petites gouttes uniquement dans la zone de recirculation de coin de la phase gazeuse, et une accumulation de grosses gouttes juste à la sortie du swirler. Des explications sur ces accumulations seront données dans la section 8.3.3.

On s'intéresse maintenant à la cinétique de l'écoulement total. Sur la figure 8.2 sont représentés les champs moyens de vitesse axiale, d'énergie cinétique, d'énergie turbulente et d' énergie décorrélée de la phase liquide totale :

$$E_{kin}^{tot} = \frac{1}{2}\left(< U_{l,1}^{tot} >^2 + < U_{l,2}^{(p)} >^2 + < U_{l,3}^{tot} >^2\right) \tag{8.6}$$

$$E_{turb}^{tot} = \frac{1}{2}\left(< U_{l,1}^{tot,RMS} >^2 + < U_{l,2}^{(p),RMS} >^2 + < U_{l,3}^{tot,RMS} >^2\right) \tag{8.7}$$

avec :

$$U_{l,i}^{tot,RMS} = \sqrt{(< U_{l,i}tot)^2 > - < U_{l,i}^{tot} >^2} \tag{8.8}$$

Contrairement à la phase gazeuse, la zone de recirculation centrale, matérialisée par l'isocontour de vitesse axiale nulle, ne démarre pas à la sortie du swirler, mais beaucoup plus en aval de l'écoulement. Cependant, la zone de recirculation de coin du liquide ressemble beaucoup à celle du gaz. Cela est dû aux grosses gouttes qui vont au centre de l'écoulement, en s'adaptant très lentement à la vitesse du gaz, alors que les petites gouttes vont à la périphérie, en s'adaptant rapidement à la vitesse du gaz. Les champs d'énergies montrent bien l'importance de la turbulence, moins grande pour la phase gazeuse, en raison de l'inertie de la phase liquide. De plus, la part importante d'énergie décorrélée justifie l'utilisation d'une modélisation RUM.

8.3.2 Analyse par section

Après avoir analysé le comportement de la phase liquide totale, on s'intéresse au comportement par section. On se limitera à l'observation de trois sections de l'écoulement : $15-30\mu m$, $60-75\mu m$ et $135-150\mu m$. Ces trois sections correspondent aux petites, moyennes et grosses gouttes de l'écoulement. Pour les petites gouttes, la section $0-15\mu m$ n'a pas été utilisée, étant donné le faible nombre de gouttes la constituant.

1. La température wet-bulb est la température maximale que peut atteindre la goutte, à laquelle l'évaporation suit la loi du d^2.

Sur la figure 8.3, la répartition moyenne de liquide, en densité de gouttes et en fraction volumique est visualisée pour chaque section. Les petites gouttes ont une fraction volumique négligeable, et c'est l'inverse pour grosses gouttes. Les gouttes moyennes ont un comportement intermédiaire. Les observations précédentes sur la répartition des gouttes dans la chambre sont confirmées : les grosses gouttes se retrouvent autour et en aval de la zone de recirculation, et les petites gouttes s'accumulent près de la paroi du fond de chambre, en raison de la recirculation de coin.

Sur la figure 8.4, on s'intéresse aux énergies cinétiques moyenne, turbulente et décorrélée par section :

$$E_{kin}^{(p)} = \frac{1}{2}\left(< U_{l,1}^{(p)} >^2 + < U_{l,2}^{(p)} >^2 + < U_{l,3}^{(p)} >^2\right) \tag{8.9}$$

$$E_{turb}^{(p)} = \frac{1}{2}\left(< U_{l,1}^{(p),RMS} >^2 + < U_{l,2}^{(p),RMS} >^2 + < U_{l,3}^{(p),RMS} >^2\right) \tag{8.10}$$

avec :

$$U_{l,i}^{(p),RMS} = \sqrt{(< U_{l,i}^{(p)})^2 > - < U_{l,i}^{(p)} >^2} \tag{8.11}$$

Le comportement cinétique est complètement différent pour chaque section. Les petites gouttes présentent une répartition d'énergie cinétique similaire à celle du gaz, avec des fortes vitesses, et une faible dispersion. Le niveau d'énergie cinétique turbulente est élevé, indiquant le caractère fortement turbulent de cette section, alors que le niveau d'énergie décorrélée est relativement faible, avec des valeurs maximales se situant dans la zone de cisaillement où les gouttes ne sont pas encore à l'équilibre à la vitesse du gaz (rappelons que le cisaillement produit de l'énergie décorrélée (Eq. 2.79)). L'énergie cinétique moyenne des grosses gouttes est faible par rapport aux petites gouttes. Le niveau d'énergie turbulente est négligeable, alors que l'énergie décorrélée est relativement importante. Ce comportement est en accord avec le caractère très inertiel des grosses gouttes. L'énergie décorrélée est proportionnelle au temps de relaxation des particules (ce qui est exprimé par la modélisation de la viscosité RUM $\nu_{RUM} = \tau_p \delta\Theta_l/3$). Enfin, les gouttes moyennes présentent des énergies cinétiques intermédiaires.

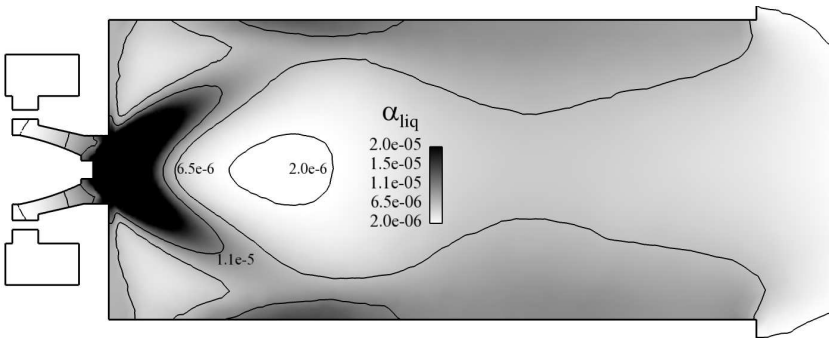
La figure 8.5 illustre le comportement des modèles : visualisant le ratio entre la viscosité dûe au mouvement décorrélé (ν_{RUM}) et la viscosité de sous-maille ($\nu_{TURB,tpf}$), et le ratio entre la pression du mouvement décorrélé (P_{RUM}) et la pression de sous-maille du liquide ($P_{TURB,tpf}$). Notons la différence des échelles pour chaque section. Pour les petites gouttes, la viscosité RUM et la pression RUM sont faibles par rapport à la viscosité et la pression de sous-maille. Pour les grosses gouttes, c'est l'inverse, alors que pour les gouttes moyennes, les deux contributions sont importantes. Ce point est intéressant par rapport aux résultats des travaux de Sanjosé [2009] avec l'approche FEM monodisperse, où la modélisation de sous-maille est toujours négligeable devant la modélisation RUM. Le FEMM montre que les effets des modélisations RUM et sous-maille sont tous importants et dépendent de la taille.

8.3.3 Écoulement proche injecteur et comportement aux parois

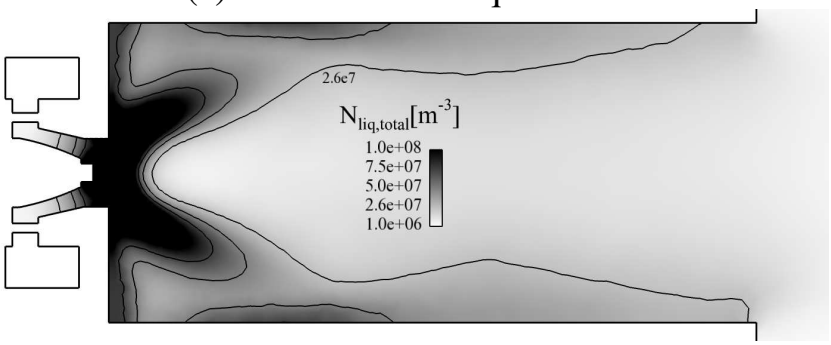
La configuration simulée dans ce travail présente deux problématiques particulières : l'écoulement proche injecteur et le comportement aux parois. Le premier est lié au maillage et le second est lié au formalisme.

La Figure 8.6 montre une coupe de fraction volumique en zone proche injecteur pour la première et la dernière section. Le maillage est aussi représenté. Malgré le fait que ce soit la zone la plus raffinée de tout le maillage, seulement une dizaine de cellules décrivent la surface d'injection. Cela conduit à "diffuser" numériquement la fraction volumique, notamment vers l'axe de la chambre. Cet effet de diffusion est sensible aussi bien pour les grosses gouttes que pour les petites gouttes. Cependant les petites gouttes, faiblement inertielles, sont très rapidement entraînées par le gaz, ce qui limite l'effet de la diffusion. Par contre, les grosses gouttes, fortement inertielles, vont plus subir l'effet de la diffusion. Le résultat est que une partie du flux des grosses gouttes est "piégée" sur l'axe de la chambre, et augmente donc fortement le diamètre moyen dans cette zone.

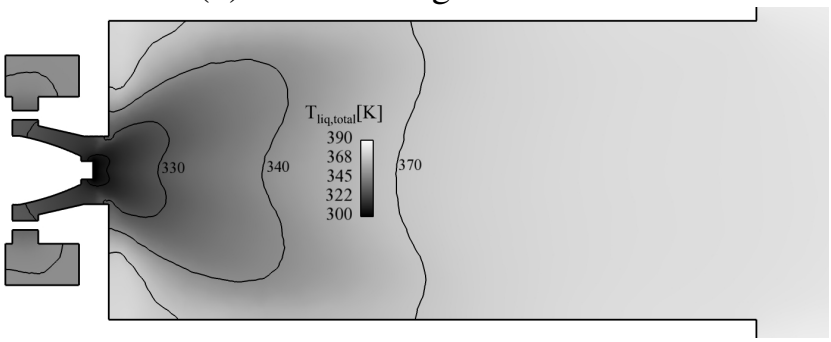
La problématique du comportement aux parois est tout autre. Les expériences de Garcia-Rosa [2008] ont montré que le jet liquide impactait sur la paroi. Dans les modélisations eulériennes, la prise en compte d'interactions gouttes-parois de type rebond n'est possible que pour le transport d'un grand nombre de moments supplémentaires, comme dans Schneider et al. [2010]. Ici, le traitement à la paroi se limite à une annulation de la composante normale, sans modification de la vitesse tangentielle. La figure 8.7 montre l'écoulement correspondant à la phase liquide totale sur une paroi latérale et sur le fond de chambre. Les trajectoires représentées sont "fictives", puisque ce sont des lignes de courant construites avec les composantes axiales et radiales de la vitesse. En fonction du point de départ de l'élément fluide, celui-ci pourra sortir du domaine en passant par la périphérie de la recirculation centrale, ou impacter la paroi et sortir du domaine en la longeant, ou encore être capturé par la recirculation de coin. De plus, certaines "pseudo-trajectoires" peuvent impacter la paroi, la longer jusqu'au fond de chambre, puis revenir dans l'écoulement au niveau du swirler. Ce comportement peut s'apparenter à la physique d'un film liquide ruisselant sur une paroi, mais on ne peut qualifier cette modélisation de prédictive. La prise en compte des interactions gouttes-parois est donc un développement nécessaire, mais hors de l'objectif de cette thèse. Les simulations lagrangiennes de Senoner [2010] prennent en compte ces interactions goutte-paroi par un modèle de rebond élastique, mais cela ne devra pas trop avoir d'influence sur les diagnostics proposés ici, les mesures étant toutes effectuées avant la zone de rebond. Par contre, cela peut fortement influer sur la répartition de liquide en aval de la zone d'impact.



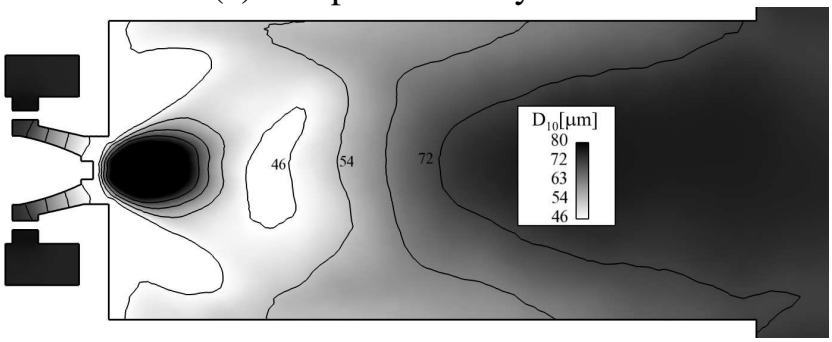
(a) Fraction volumique totale



(b) Nombre de gouttes total

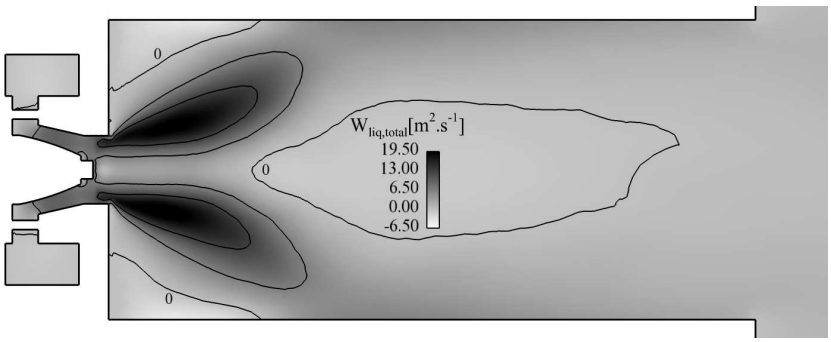


(c) Température moyenne

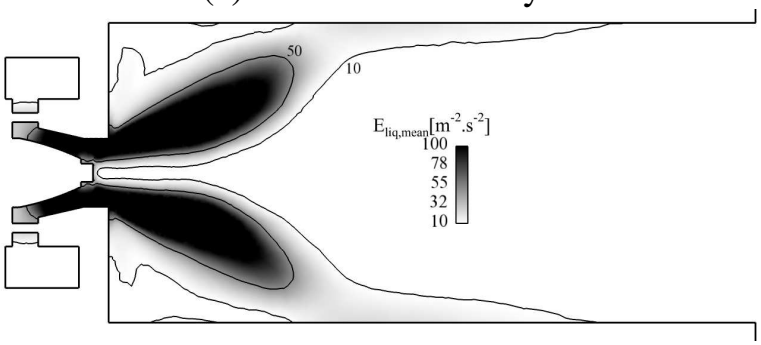


(d) Diamètre moyen (D10)

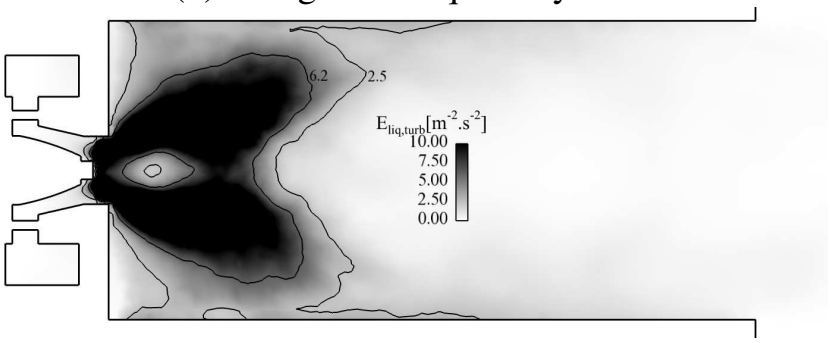
FIGURE 8.1 – Coupe longitudinale des champs moyens de la phase liquide totale : fraction volumique (a), densité en nombre de gouttes (b), température (c) et D10 (d).



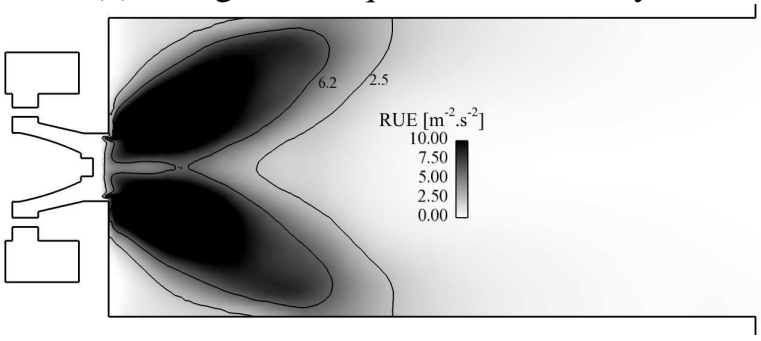
(a) Vitesse axiale moyenne



(b) Énergie cinétique moyenne



(c) Énergie cinétique turbulente moyenne



(d) Énergie décorrélée moyenne

FIGURE 8.2 – Coupe longitudinale des champs moyens de la phase liquide totale : vitesse axiale (a), énergie cinétique (b), énergie cinétique turbulente (c), et énergie décorrélée (d).

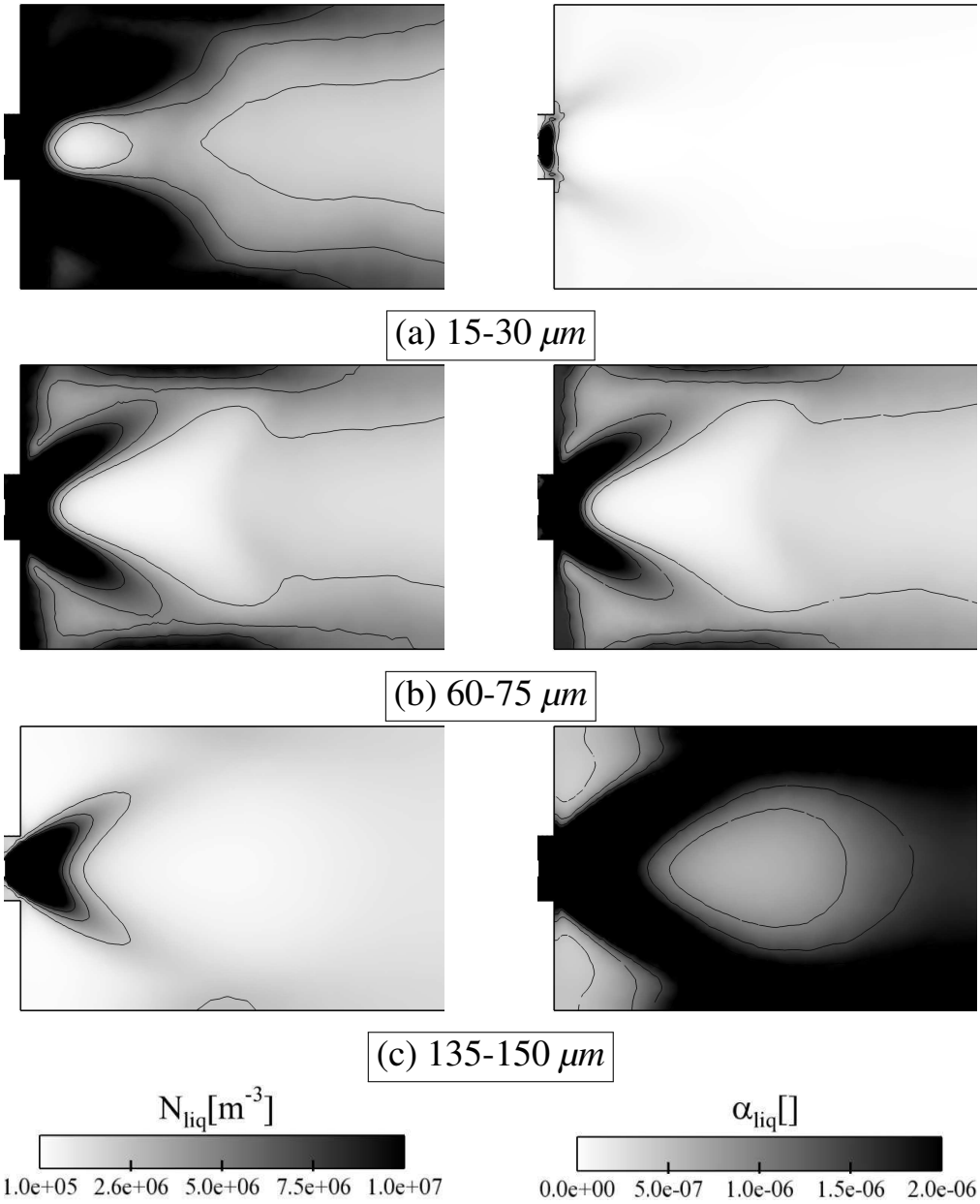


FIGURE 8.3 – Coupe longitudinale de champs moyens pour les sections $15-30\mu m$ (a), $60-75\mu m$ (b) et $135-150\mu m$ (c) : densité en nombre de gouttes (gauche) et fraction volumique (droite).

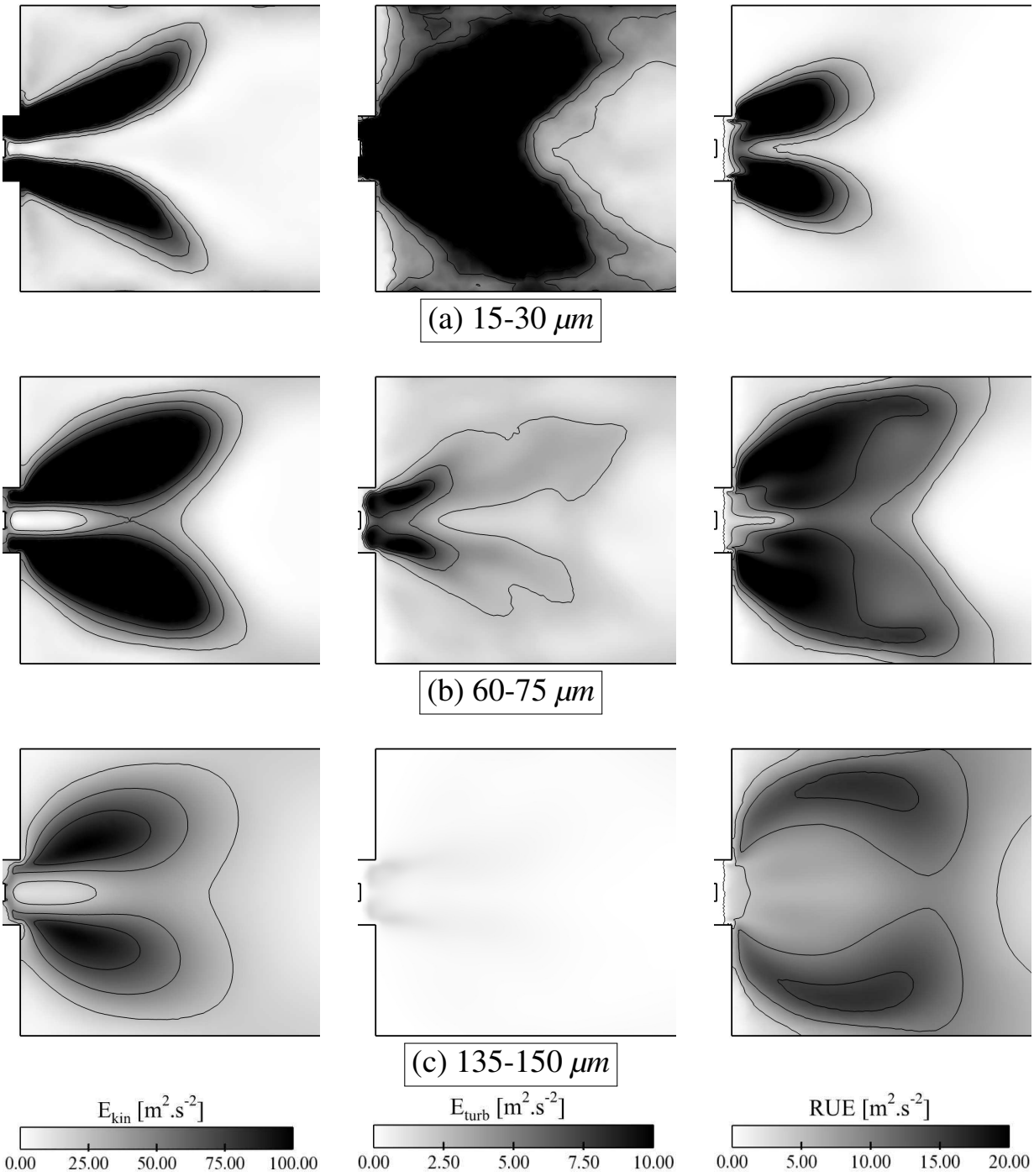


FIGURE 8.4 – Coupe longitudinale de champs moyens pour les sections $15-30\mu m$ (a), $60-75\mu m$ (b) et $135-150\mu m$ (c) : énergie cinétique (gauche), énergie turbulente (centre) et énergie décorrélée (droite).

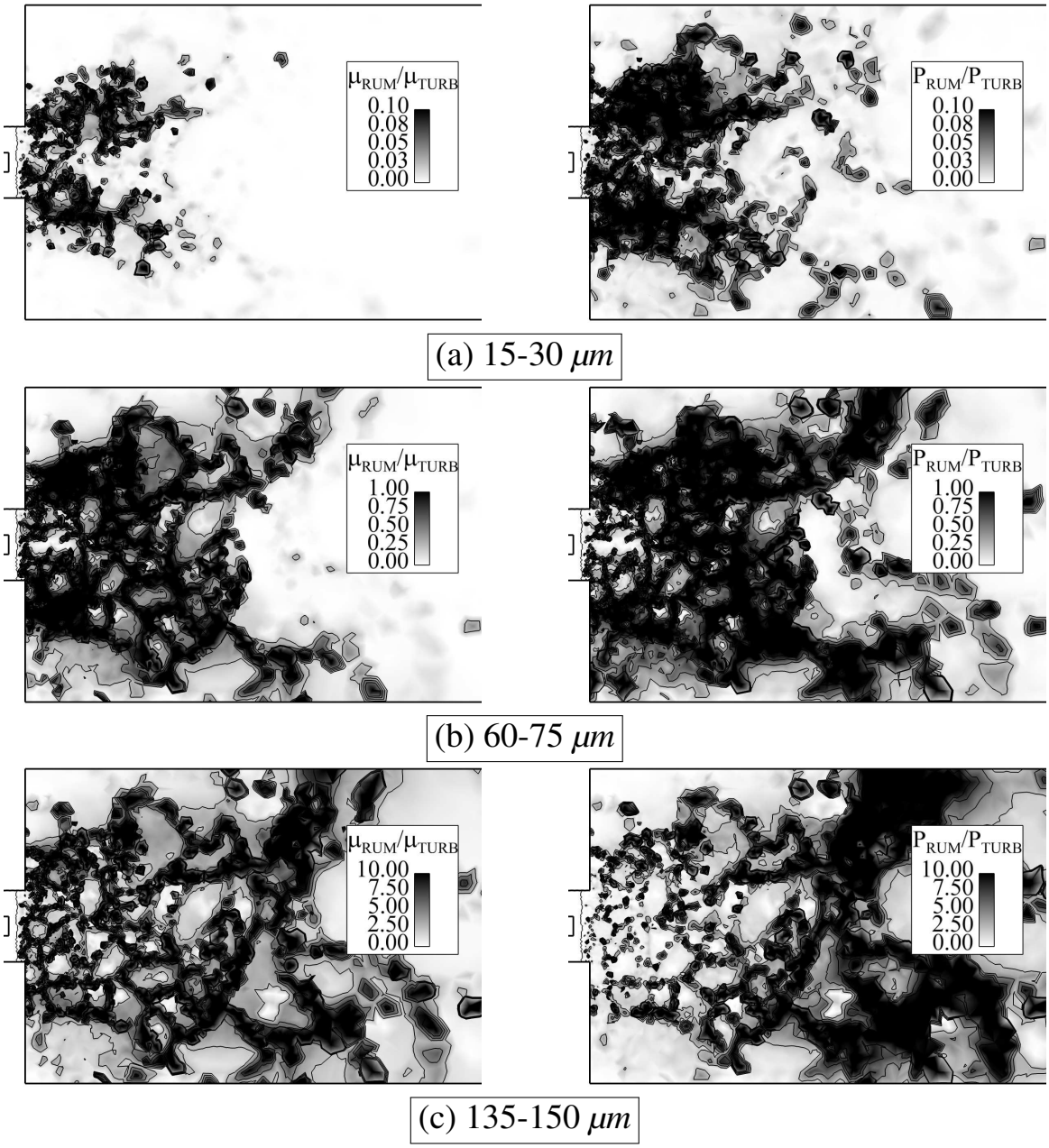


FIGURE 8.5 – Coupe longitudinale de champs moyens pour les sections 15-30 μm(a), 60-75 μm(b) et 135-150 μm(c) : ratio de la viscosité RUM sur la viscosité turbulente (gauche) et ratio de la pression RUM sur la pression de sous-maille (droite).

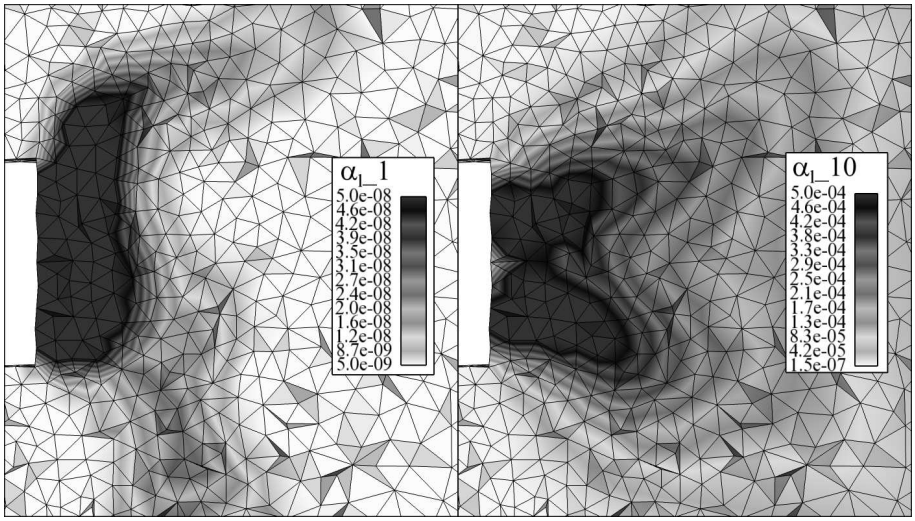


FIGURE 8.6 – Coupe longitudinale instantanée de fraction volumique de la section $0-15\mu m$ (gauche) et la section $135-150\mu m$ (droite) classe, à la sortie de l'injecteur, avec la visualisation du maillage.

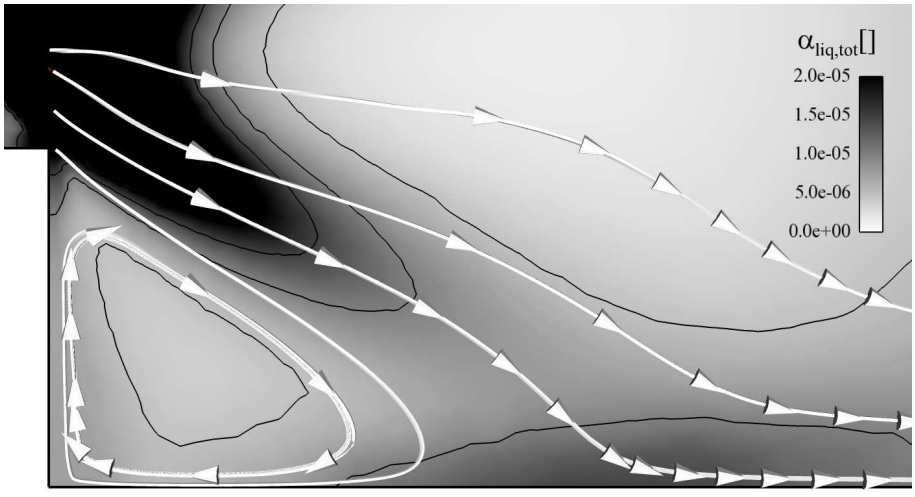


FIGURE 8.7 – Coupe longitudinale de fraction volumique totale moyenne dans la zone proche paroi, et pseudo-lignes de courant décrivant le mouvement axial et radial de la phase liquide totale.

8.4 Comparaison à l'expérience et aux autres approches

8.4.1 Fraction volumique de liquide

On compare sur la figure 8.8 les champs de fraction volumique moyenne obtenus avec le FEMM, le FEM et l'approche lagrangienne (EL). Globalement les trois approches donnent des structures similaires : impact à la paroi, zones de vide et de recirculation. Avec le FEM monodisperse, le liquide est complètement évaporé après la zone d'impact à la paroi, alors que les deux approches polydisperses ont une fraction volumique en sortie, plus grande pour le FEMM. Ceci peut être relié à la diffusion dans l'espace des tailles que subit le FEMM, qui a tendance à maintenir plus de gouttes dans les sections à gros diamètre.

8.4.2 Vitesses moyennes

La figure 8.9 compare les vitesses axiales moyennes obtenues par mesure et par les trois approches. Les trois approches de modélisation reproduisent la même forme des profils, mais quelques différences apparaissent. Sur le profil à 6mm, le FEM, monodisperse, est en très bon accord avec l'expérience. Le FEMM et l'EL, tous deux polydisperses, sous-estiment de la même manière la vitesse axiale au centre, et les pics de vitesse axiale sont surestimés par l'EL alors que le FEMM est en accord avec l'expérience. Sur le profil à 26mm, la vitesse au centre n'est bien capturée que par le FEM : Le FEMM la surestime et l'EL la sous-estime en raison d'une probabilité trop importante de petites gouttes (voir section 8.4.4 sur les densités de probabilité). Le maximum est capturé par les trois approches. La position de la zone de recirculation de coin (vitesse axiale inférieure à 0) n'est bien capturée que par les approches FEMM et EL (à 48mm de l'axe environ pour le FEMM et l'EL, à 38mm pour le FEM). Enfin sur le profil à 56mm, le maximum n'est bien prédit que par le FEM. La zone centrale est correcte pour les trois approches. La position de la recirculation externe est là encore mieux prédite par le FEMM et l'EL (58mm de l'axe), que par le FEM (50mm de l'axe).

La figure 8.10 compare les vitesses radiales moyennes. Cette fois-ci, seul le FEMM reproduit la forme expérimentale des profils pour toutes les positions. Sur le profil à 6mm, le FEMM et le FEM sont en accord avec l'expérience, et l'EL surestime la vitesse. La zone externe, pour laquelle il n'y a pas de résultats expérimentaux, est reproduite avec la même forme pour les trois approches, mais avec des valeurs différentes. Le profil à 26mm n'est parfaitement capturé par aucune approche, mais l'approche FEMM est proche du profil expérimental, décalant le maximum de 5mm environ, et ayant un maximum plus faible. Le FEM est proche du FEMM et de l'expérience pour la partie centrale, mais inverse fortement la vitesse pour la partie externe. L'EL est proche du FEMM dans la zone externe, mais présente un comportement surprenant dans la zone centrale, où un maximum local non-conforme apparaît, qui n'existe pas dans les résultats expérimentaux. Le profil à 56mm est prédit de la même manière par le FEM et le FEMM : le maximum est sous-estimé mais bien positionné. L'EL sous-estime

et décale un peu ce maximum, et présente toujours un maximum local non conforme à l'expérience dans la partie centrale.

Enfin, la figure 8.11 compare les vitesses orthoradiales moyennes. Les trois approches reproduisent la forme des profils à toutes les positions. Sur le profil à 6mm, seul le FEM est en très bon accord avec l'expérience, le FEMM et l'EL surestimant la vitesse. Sur le profil à 26mm, l'EL capture très bien le profil, là où les deux approches eulériennes décalent et sous-estiment le maximum. Sur le profil à 56mm, les trois approches ne reproduisent pas la zone centrale, mais seules les approches FEMM et EL capturent le profil dans la zone externe.

L'analyse des vitesse moyennes sera complétée par les distributions de taille de goutte (section 8.4.4) et les statistiques par section (section 8.4.5).

8.4.3 Fluctuations de vitesse

Comme précisé dans les travaux de Sanjosé [2009], les fluctuations de vitesse liquide données par le FEM sont obtenues par addition de la valeur résolue et d'une contribution de l'énergie décorrélée. Cette contribution est définie en supposant l'isotropie des vitesses décorrélées ($\delta c_{p,i} = \sqrt{2/3.\delta\Theta_l}$). Cette hypothèse est forcément restrictive, la structure des vitesses décorrélées n'étant pas nécessairement isotrope, mais conduit à une bonne approximation des fluctuations dues au mouvement décorrélé.

La figure 8.12 compare les RMS de vitesse axiale. L'approche FEMM est globalement en bon accord avec l'expérience sur les trois profils. Le FEM prédit une forme correcte mais sous-estime les RMS pour les profils à 26 et 56 mm. Sur le profil à 6 mm, l'approche qui donne le meilleur accord avec l'expérience est le FEM, suivi du FEMM qui surestime légèrement les RMS au bord du spray. L'EL donne des pics très prononcés et surestime le maximum. A 26 mm, l'EL est en très bon accord avec l'expérience en périphérie, mais surestime encore très fortement grandement les RMS dans la zone centrale. Pour le profil à 56 mm, les deux approches polydisperses sont proches.

Pour les RMS de vitesse radiale (figure 8.13), c'est encore l'approche FEMM qui donne globalement les meilleurs résultats. Le profil à 6mm surestime le maximum (comme l'EL) mais les profils à 26 et 56 mm sont en très bon accord avec les mesures. Le FEM est très bon à 6 mm, puis sous-estime les RMS à 26 et 56 mm, avec toutefois la bonne forme de profil. Enfin, l'EL capture bien les RMS dans la zone extérieure, mais les surestime grandement dans la zone centrale.

Enfin les RMS de vitesse orthoradiale sont tracés figure 8.14. Le FEMM est ici moins performant. Sur le profil à 6mm, le FEM est toujours en très bon accord avec les mesures, l'EL surestime le maximum mais prédit bien la forme du profil, alors que le FEMM surestime les RMS sur l'ensemble du profil, y compris en périphérie du spray. Cette différence en périphérie du spray se retrouve sur le profil à 26mm, où le FEMM donne des niveaux trop élevés. Le FEM et l'EL capturent des RMS équivalentes en périphérie du spray. Le FEM les sous-estime dans la zone centrale, là où l'EL les surestime. Enfin, sur le

profil à 56mm, les trois approches souffrent. La forme du profil n'est capturée que par l'EL, mais avec des niveaux trop importants en périphérie. Les approches eulériennes quant à elles ne capturent pas du tout le profil. Une cause possible de ces différences est donnée ci-après.

L'étude des RMS de la phase liquide obtenue par le FEMM est complétée par l'analyse des contributions dûes au mouvement décorrélé, et à la fluctuation du mouvement moyen, tracées sur les figures 8.15 , 8.16 et 8.17. Les deux contributions sur les vitesses axiales et radiales ont la même forme de profil (mêmes variations et positions des maxima) et des niveaux similaires. Pour la vitesse orthoradiale (figure 8.17), les deux contributions ont des profils plus différents et un niveau légèrement supérieur pour le RUM. Ceci pourrait s'expliquer par l'hypothèse d'isotropie de la contribution RUM. En effet, le mouvement décorrélé dépend du cisaillement, et Masi [2010] a montré que le tenseur de déformation S_{ij} et le tenseur d'ordre 2 de l'équation de quantité de mouvement ($R_{p,ij}$) sont relativement alignés. Pour poursuivre l'analyse, on s'intéresse au paramètre $s*$:

$$s^* = -3\sqrt{6}\frac{\lambda_1\lambda_2\lambda_3}{(\lambda_1^2+\lambda_2^2+\lambda_3^2)^{3/2}} \tag{8.12}$$

où λ_1, λ_2, λ_3 sont les valeurs propres du tenseur S^*_{ij}. Ce paramètre proposé par Lund and Rogers [1994] est borné entre -1 et 1, et permet de caractériser le tenseur : si $s^* = -1$, une valeur propre est dominante, et si $s^* = 1$, deux valeurs propres sont dominantes. Pour ces deux valeurs extrêmes, le tenseur présente une ou deux directions privilégiées (associées aux vecteurs propres). Sur la figure 8.18, on peut voir que s^* atteint régulièrement des valeurs de 1 ou -1, confirmant le fait que le tenseur de cisaillement a une direction privilégiée. Comme le tenseur de second ordre des contraintes décorrélées est relativement aligné avec le tenseur de cisaillement, les contraintes ne seront certainement pas isotropes, et les vitesses décorrélées non plus. Pour produire une analyse plus fine des RMS, il faudrait donc reconstruire les composantes de la vitesse décorrélée sans l'hypothèse d'isotropie. Ceci n'a pas été fait dans ce travail, et cette éventualité devra être étudiée dans les prochains travaux sur cette configuration.

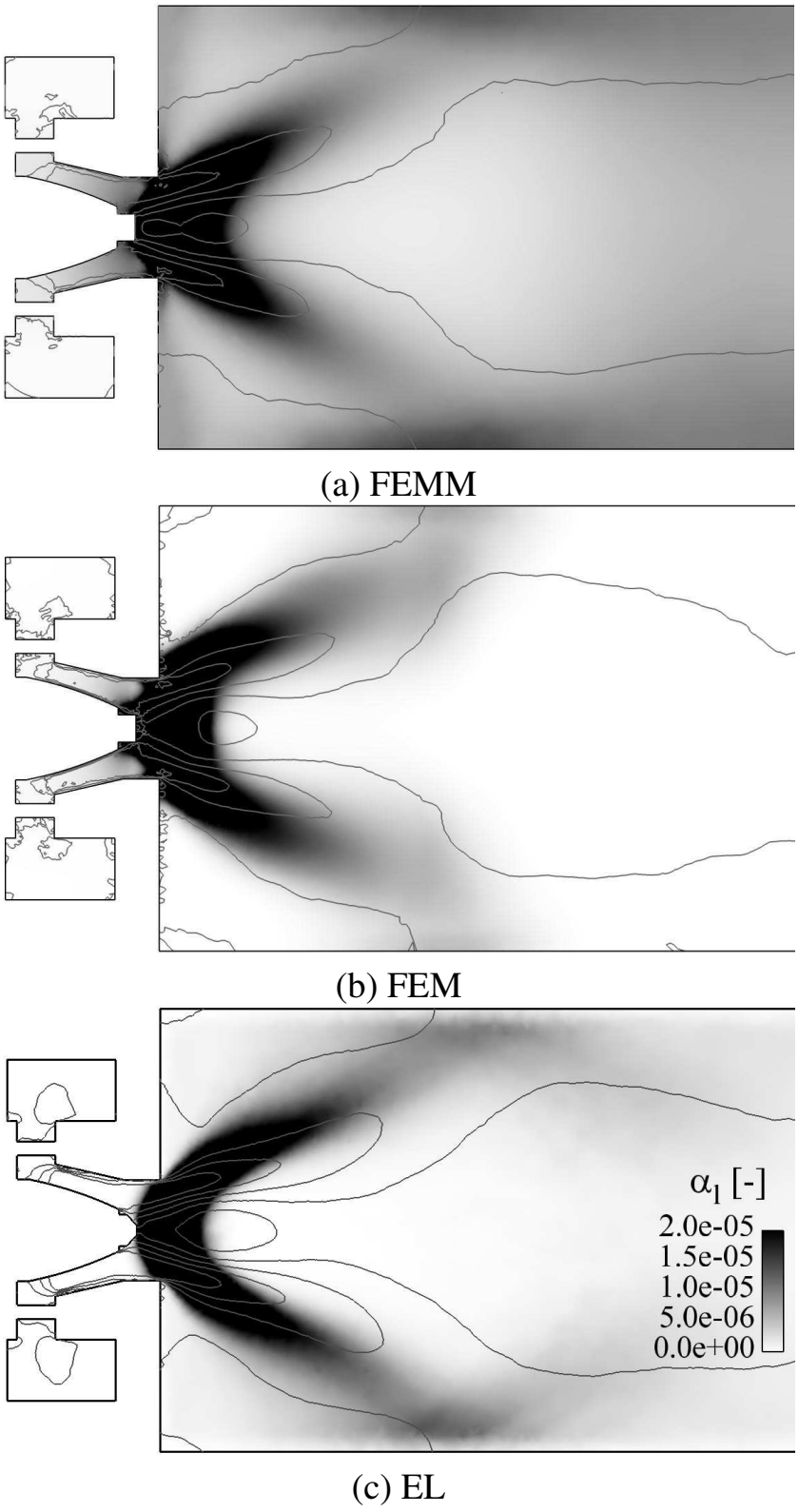


FIGURE 8.8 – Coupe longitudinale de fraction volumique totale moyenne : comparaison entre FEMM (a), FEM (b) et EL (c).

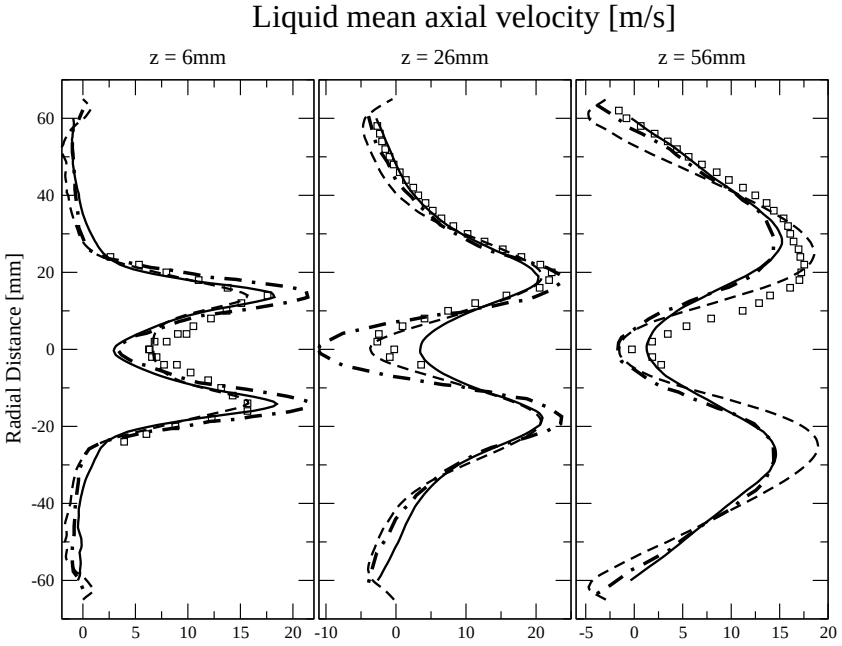


FIGURE 8.9 – Profils de vitesse axiale du liquide à 6, 26 et 56 mm du fond de chambre : expérience (carrés), FEMM (ligne continue), FEM (ligne tiretée) et EL (ligne point-tiretée).

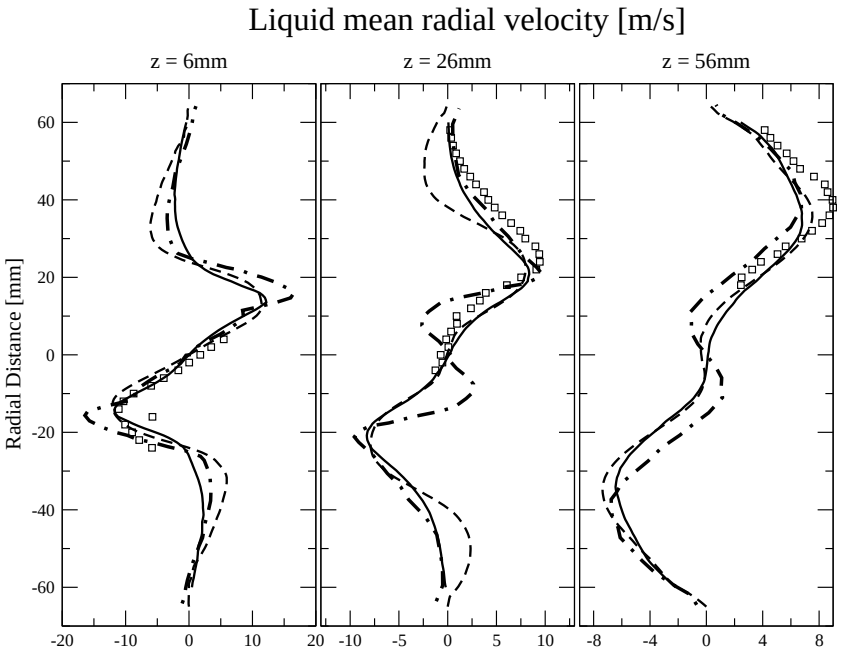


FIGURE 8.10 – Profils de vitesse radiale du liquide à 6, 26 et 56 mm du fond de chambre : expérience (carrés), FEMM (ligne continue), FEM (ligne tiretée) et EL (ligne point-tiretée).

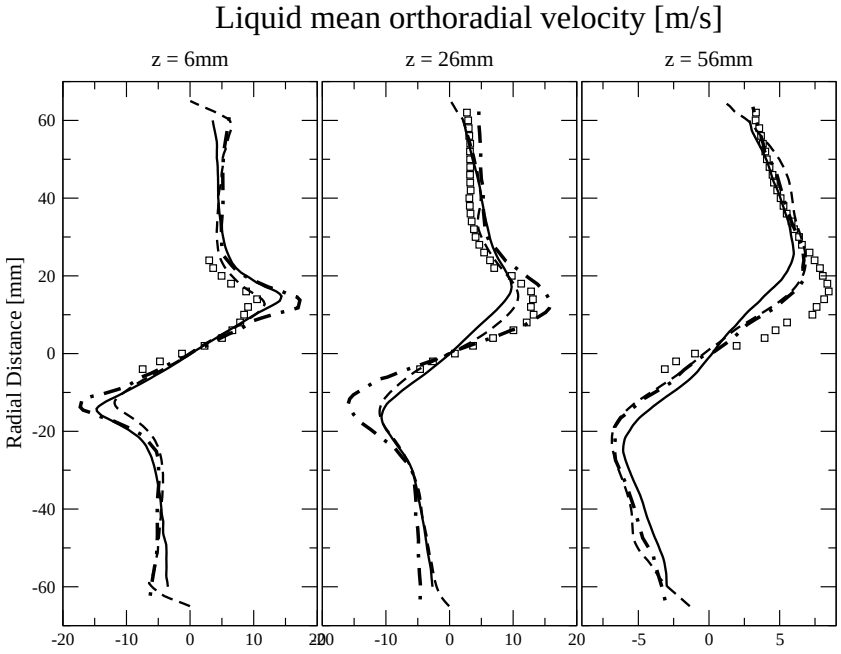


FIGURE 8.11 – Profils de vitesse orthoradiale du liquide à 6, 26 et 56 mm du fond de chambre : expérience (carrés), FEMM (ligne continue), FEM (ligne tiretée) et EL (ligne point-tiretée).

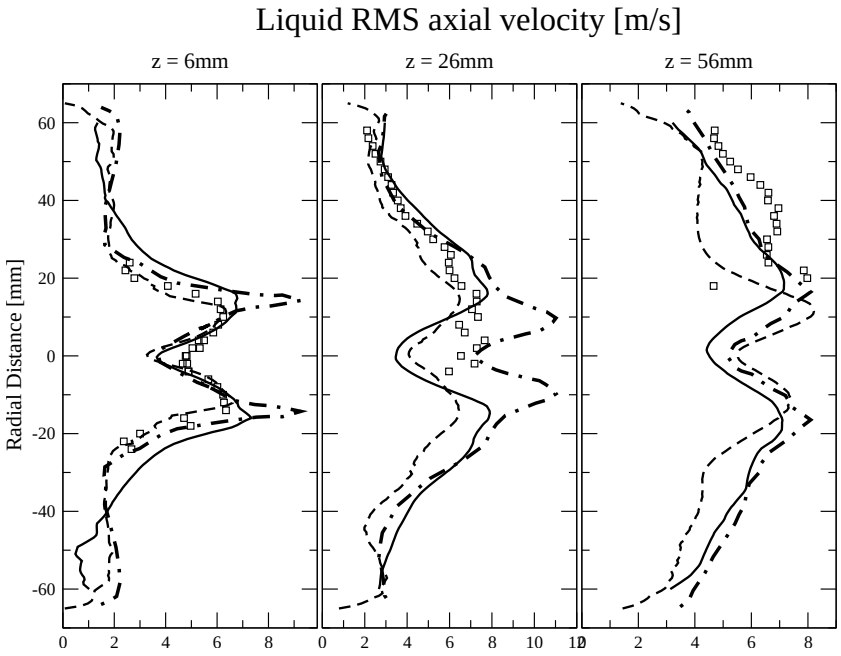


FIGURE 8.12 – Profils de RMS de vitesse axiale du liquide à 6, 26 et 56 mm du fond de chambre : expérience (carrés), FEMM (ligne continue), FEM (ligne tiretée) et EL (ligne point-tiretée).

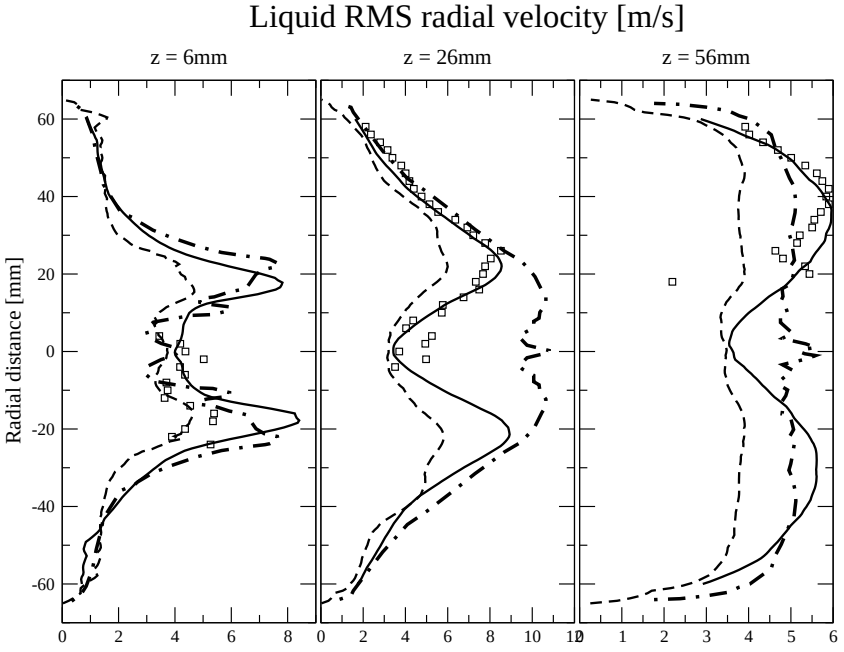


FIGURE 8.13 – Profils de RMS de vitesse radiale du liquide à 6, 26 et 56 mm du fond de chambre : expérience (carrés), FEMM (ligne continue), FEM (ligne tiretée) et EL (ligne point-tiretée).

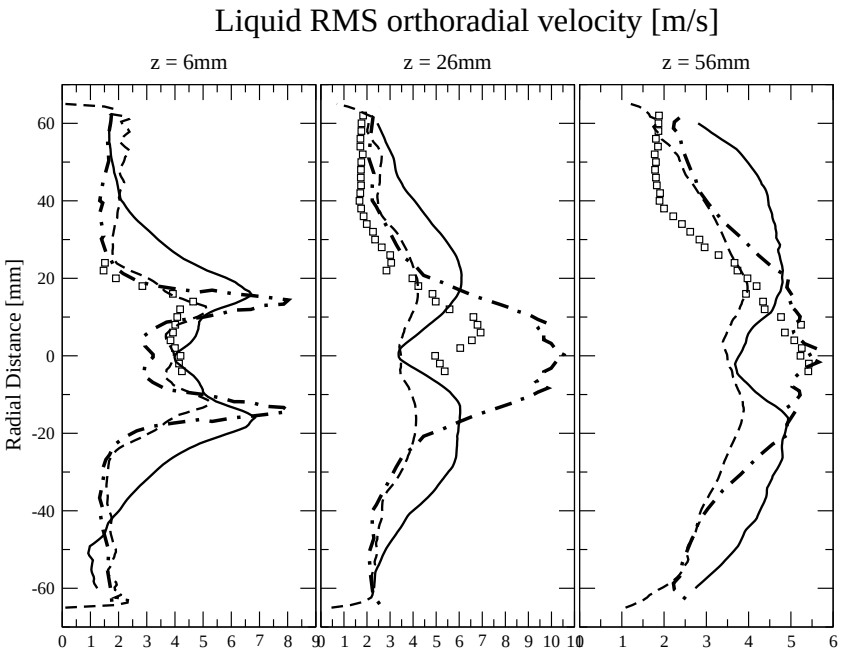


FIGURE 8.14 – Profils de RMS de vitesse orthoradiale du liquide à 6, 26 et 56 mm du fond de chambre : expérience (carrés), FEMM (ligne continue), FEM (ligne tiretée) et EL (ligne point-tiretée).

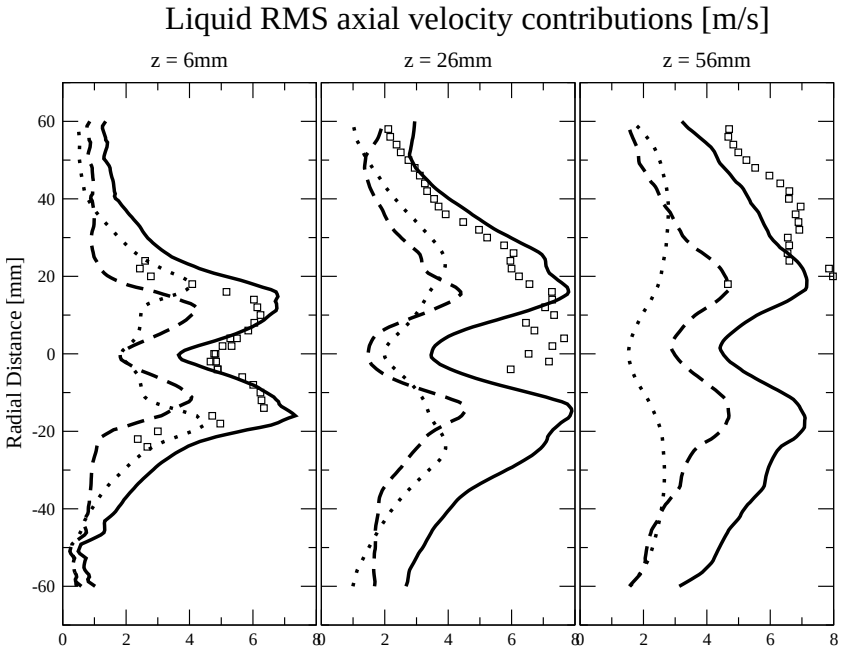


FIGURE 8.15 – Profils de RMS de vitesse axiale du liquide à 6, 26 et 56 mm du fond de chambre pour le FEMM : RUM+RMS résolus (ligne continue), RMS résolus (ligne tiretée), et RUM (ligne pointillée).

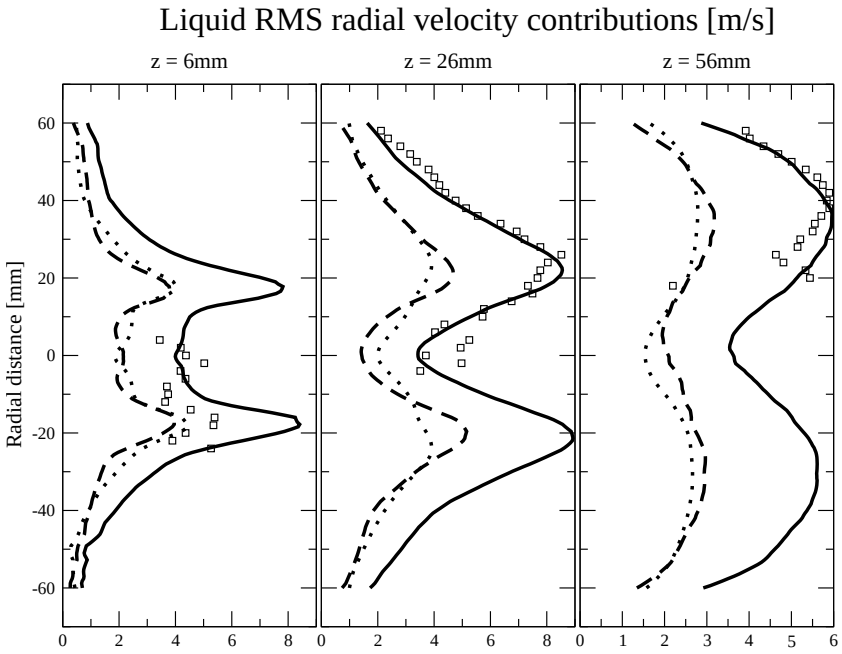


FIGURE 8.16 – Profils de RMS de vitesse radiale du liquide à 6, 26 et 56 mm du fond de chambre pour le FEMM : RUM+RMS résolus (ligne continue), RMS résolus (ligne tiretée), et RUM (ligne pointillée).

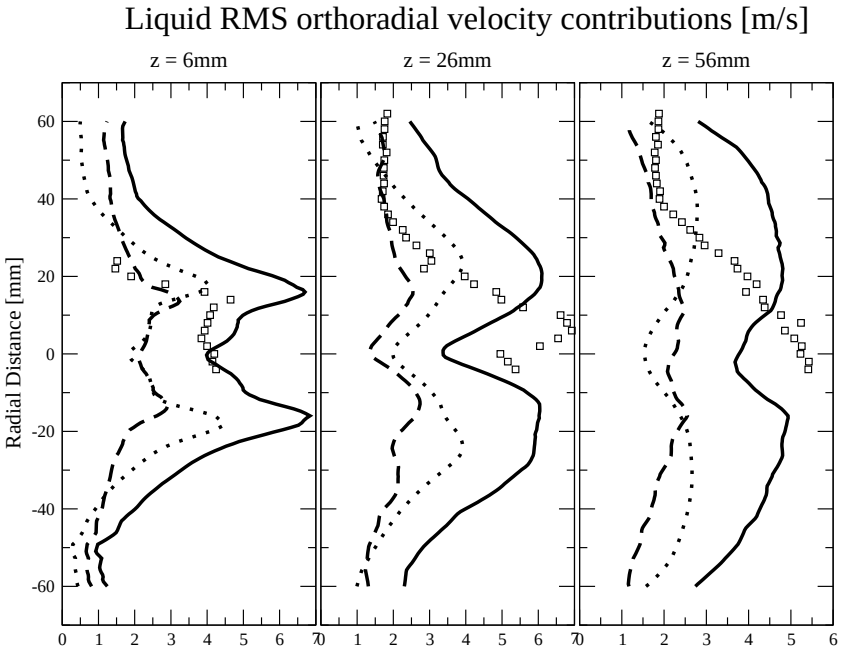


FIGURE 8.17 – Profils de RMS de vitesse orthoradiale du liquide à 6, 26 et 56 mm du fond de chambre pour le FEMM : RUM+RMS résolus (ligne continue), RMS résolus (ligne tiretée), et RUM (ligne pointillée).

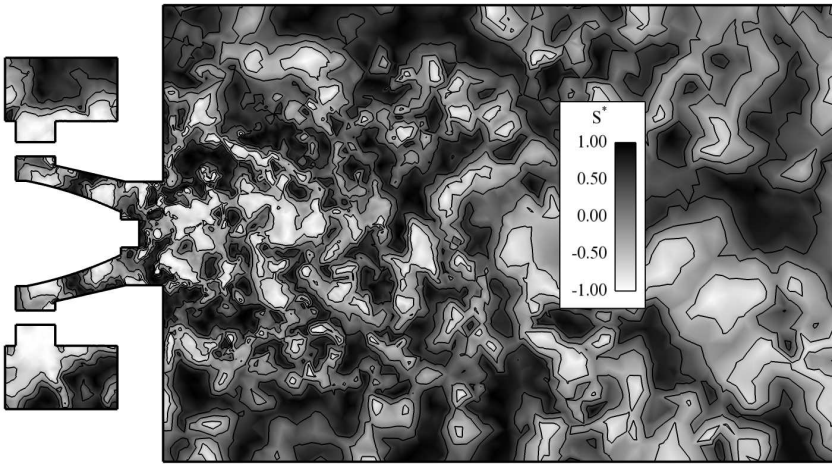


FIGURE 8.18 – Coupe longitudinale instantanée du paramètre s* du tenseur de cisaillement de la phase liquide totale.

8.4.4 Distributions de taille de gouttes

Le FEM étant monodisperse en taille et en vitesse, il ne peut capturer de fdp. On compare donc la fdp du FEMM et de l'EL. Les fdp sont mesurées en huit points de l'écoulement, à 6, 26 et 56mm du fond de chambre : trois mesures sont effectuées sur l'axe, deux mesures sont effectuées dans le spray et trois en périphérie du spray. L'identification de chaque point de mesure est donnée dans le tableau 8.1 et montrée sur la figure 8.19.

La figure 8.20 montre les histogrammes et les profils reconstruits. A 6 mm, on remarque que le FEMM et l'EL ne capturent pas la fdp sur l'axe et dans le spray, mais la reproduisent bien en périphérie. De plus, le FEMM surestime le nombre de grosses gouttes sur l'axe et dans le spray, mais retrouve le pic de gouttes de l'EL, à environ $70\mu m$ (qui est cependant loin du pic expérimental). A 26mm, la fdp dans le spray est bien reproduite par le FEMM et l'EL. Les performances sont moins bonnes sur l'axe, mais ce point de mesure est dans une zone à très faible nombre de gouttes, et donc peu caractéristique de l'écoulement. Enfin, à 56mm, un bon accord entre le FEMM, l'EL et l'expérience est obtenu. Les deux approches de modélisation reproduisent bien la forme de la fdp, avec un pic correctement placé (sauf en S3). Une présence trop importante de grosses gouttes proche de l'axe persiste pour le FEMM, alors que l'EL ne prédit jamais l'existence de gouttes au delà de $120\mu m$. Ceci peut être dû à la difficulté d'obtenir des statistiques sur un ensemble de gouttes faible en nombre. La surestimation des grosses gouttes peut être dû au problème de maillage évoqué dans la section 8.3.3 et à la diffusion dans l'espace des tailles que subit le modèle multi-fluide.

8.4.5 Statistiques par section

Pour mieux appréhender le comportement du modèle polydisperse, il est utile de regarder les grandeurs pour chaque classe de goutte. Les vitesses axiales sont tracées figure 8.21 pour l'expérience, le FEMM et l'EL. A 6mm, le FEMM et l'EL donnent des résultats très semblables à l'expérience dans le spray et en périphérie, mais sont bien différents sur l'axe. En effet, les deux approches prévoient une vitesse négative pour les petites gouttes, alors que l'expérience montre une vitesse positive quasi-constante pour toutes les gouttes. Cela explique la sous-estimation de la vitesse axiale moyenne sur l'axe à 6 mm observée sur la figure 8.9 : la contribution négative des petites gouttes diminue fortement la vitesse moyenne. De plus, le FEMM et l'EL surestiment la vitesse des plus petites gouttes en B1, et seul le FEMM capture bien toute la fdp en S1. A 26mm, la vitesse axiale dans le spray (S2) est reproduite de manière identique par les deux approches, sous-estimant toutes deux la vitesse des grosses gouttes. Sur l'axe (A2) trop peu de gouttes sont disponibles pour les statistiques pour tirer une conclusion. A 56mm, les deux approches capturent plutôt bien les vitesses à la paroi (W3), et sous-estiment la vitesse des grosses gouttes dans le spray (S3). Les vitesses sur l'axe (A3) sont de nouveau difficilement interprétables, en raison du manque de gouttes pour les statistiques.

Concernant la vitesse radiale moyenne (figure 8.22), le FEMM et l'EL sont toujours assez proches et en bon accord avec l'expérience à 6 mm. Les vitesses sur l'axe sont à nouveau mal estimées par manque de gouttes. A 56mm, les vitesses sont globalement sous-estimées pour toutes les tailles par les deux approches, avec des résultats un peu meilleurs pour le FEMM.

Finalement, la vitesse orthoradiale moyenne est tracée figure 8.23. Là encore l'EL et le FEMM sont assez proches et en bon accord avec les mesures. La vitesse sur l'axe est mal reproduite du fait du manque de gouttes. Légèrement surestimée à 6 mm, la vitesse est plutôt sous-estimée à 56 mm. A 26 mm, la vitesse est surestimée pour les petites gouttes puis sous-estimée pour les plus grosses.

Globalement, les vitesses obtenues pour les grosses gouttes sont trop faibles par rapport aux mesures, ce qui explique que les vitesses moyennes (figures 8.9, 8.10 et 8.11) soit souvent sous-estimées. Ceci peut être attribué à plusieurs raisons : la méthode numérique, la modélisation RUM ou encore l'approche multi-fluide d'ordre 1.

La méthode numérique peut par diffusion numérique ralentir les gouttes. Les petites gouttes ne sont pas trop sensible à ce phénomène, puisque la traînée les ramène rapidement à la vitesse du gaz. Par contre, les grosses gouttes conservent cette vitesse, et sont donc progressivement ralenties, l'écart entre les mesures et le FEMM augmentant avec la distance à l'injection.

La modélisation RUM agit aussi sur la phase liquide comme de la diffusion. Masi et al. [2010] a montré que les modèles de fermeture utilisés ici ne sont pas adaptés pour les écoulements cisaillés, surestimant fortement la viscosité RUM (particulièrement pour les nombres de Stokes élevés). La vitesse moyenne peut donc être diminuée par cet effet, en affectant encore une fois principalement les grosses gouttes.

Enfin, l'approche multi-fluide d'ordre 1 diffuse elle aussi, mais dans l'espace des tailles, surestimant ainsi la présence de grosses gouttes. La vitesse de ces dernières étant sous-estimée en raison de la méthode numérique et de la modélisation RUM, les vitesses moyennes sont encore plus faibles.

8.4.6 Diamètre moyen

Sur la figure 8.24, sont comparés les profils de diamètre moyen $D10$ obtenus par les approches FEM, FEMM et EL à 6, 26 et 56mm du fond de chambre. Les résultats du FEM sont proches de l'expérience sur l'axe, mais sous-estiment beaucoup le D10 en périphérie. L'approche EL obtient une meilleure forme des profils, en particulier sur le dernier plan de mesure, mais les niveaux ne sont pas capturés. Finalement l'approche qui obtient les moins bons résultats est le FEMM, qui surestime beaucoup le D10 sur l'axe. Comme on a pu le voir précédemment, cet effet est dû à une accumulation de grosses gouttes sur l'axe de la chambre, mais aussi à l'influence des zones de vide, où le calcul eulérien définit un diamètre moyen non nul, (qui est ici de $75\mu m$). Sur l'axe où la charge est faible, le diamètre moyen augmentera donc naturellement. Ces conclusions sont soutenues par le fait que les valeurs de D10 sont correctes en

périphérie. A ce stade, il est important de préciser que le diamètre moyen n'a pas la même importance dans un calcul FEMM que dans un calcul FEM. En effet, le FEM calcule directement le diamètre moyen dans chaque cellule, qui est utilisé pour le calcul de la traînée et de l'évaporation, alors que le FEMM reconstruit le diamètre moyen à partir de la fdp de taille. Les lois de traînée et d'évaporation ne voient donc jamais ce D10, mais uniquement le diamètre moyen de chaque section, qui est fixe. Comme il a été dit précédemment, cette surestimation du D10 peut être causé par la faible discrétisation de la condition d'injection, mais aussi par l'approche multi-fluide d'ordre 1 qui augmente artificiellement le nombre de grosses gouttes.

coordinate	A1	S1	B1	A2	S2	A3	S3	W3
axial (mm)	6	6	6	26	26	56	56	56
radial (mm)	0	8	14	0	20	0	40	58

TABLE 8.1 – Position des points de mesure des statistiques par taille.

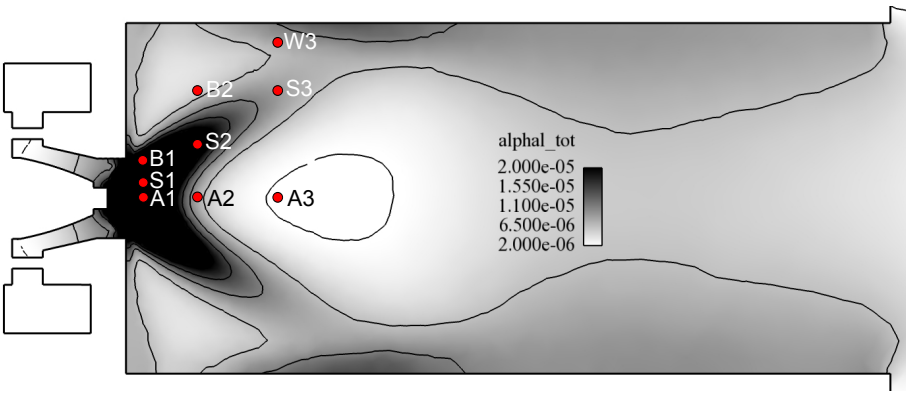
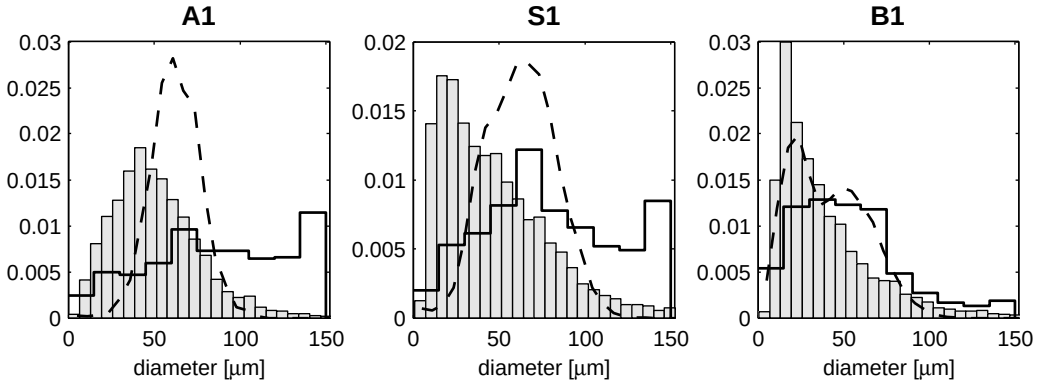
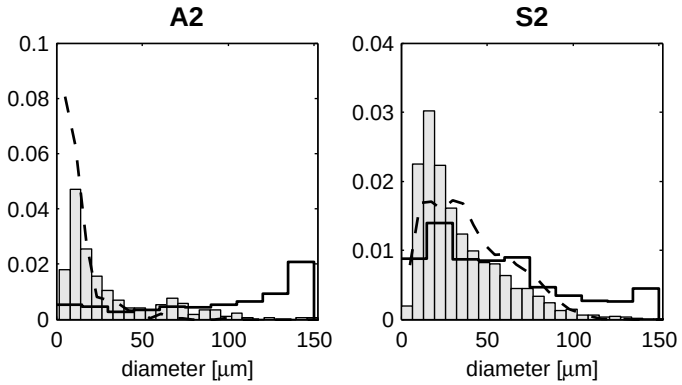


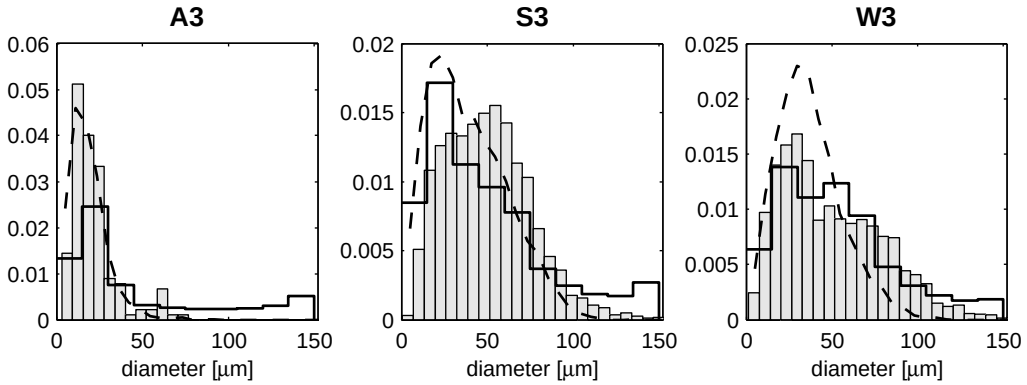
FIGURE 8.19 – Position des points de mesure des statistiques par taille.



(a) 6mm

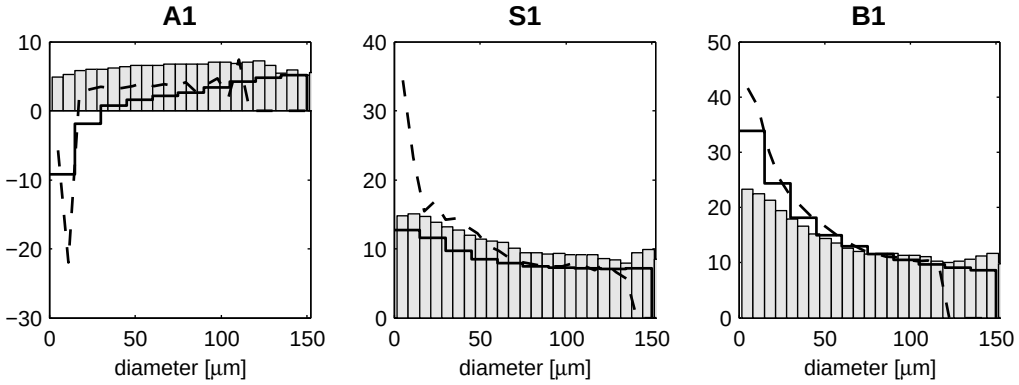


(b) 26mm

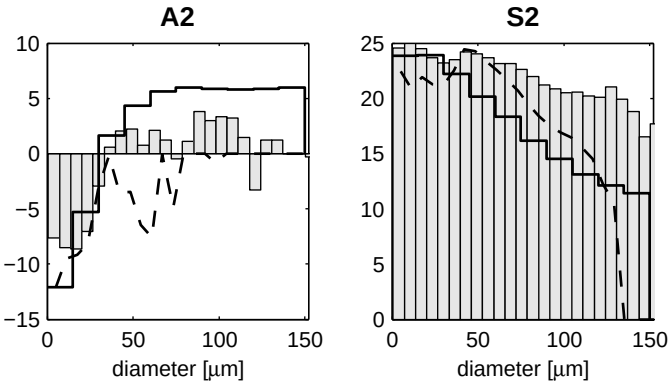


(c) 56mm

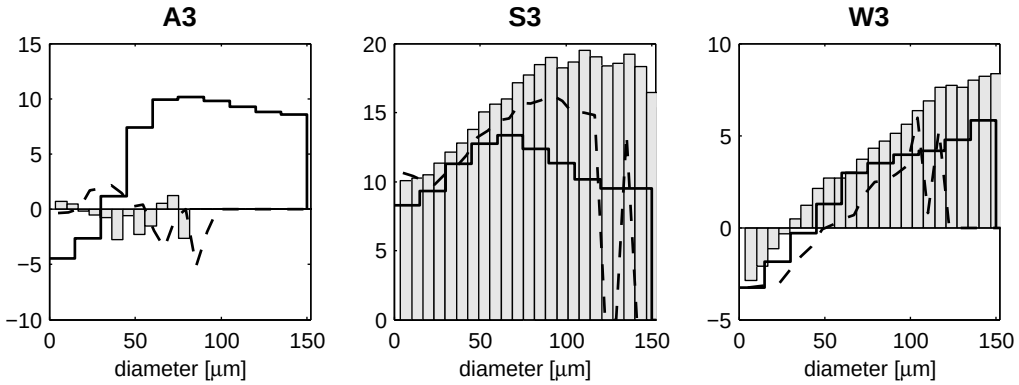
FIGURE 8.20 – Fonctions densité de probabilité à 6, 26 et 56 mm du fond de chambre : expérience (histogramme), FEMM (ligne continue) et EL (ligne discontinue).



(a) 6mm

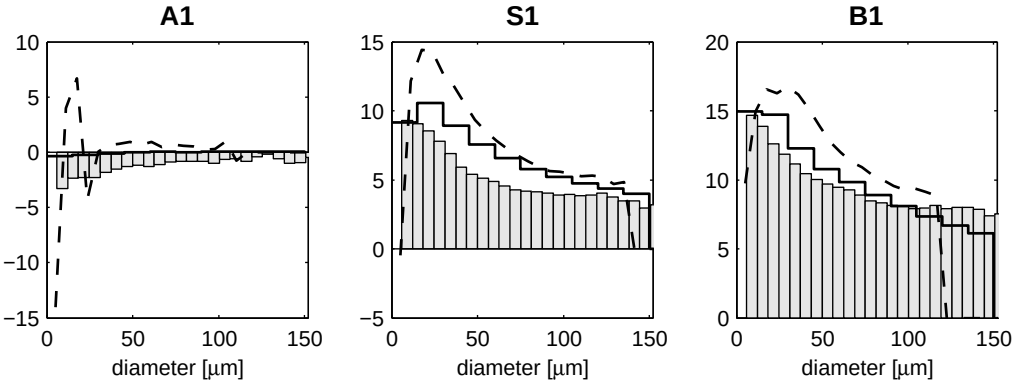


(b) 26mm

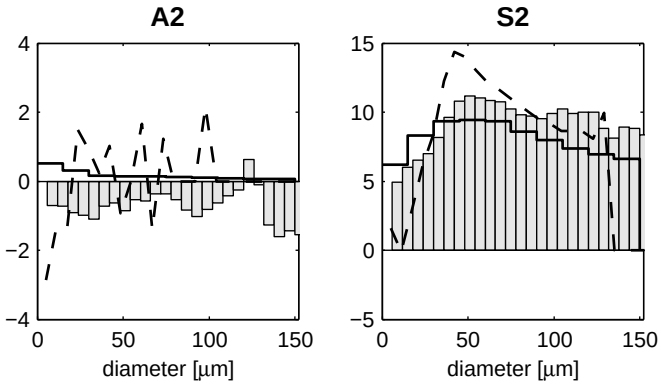


(c) 56mm

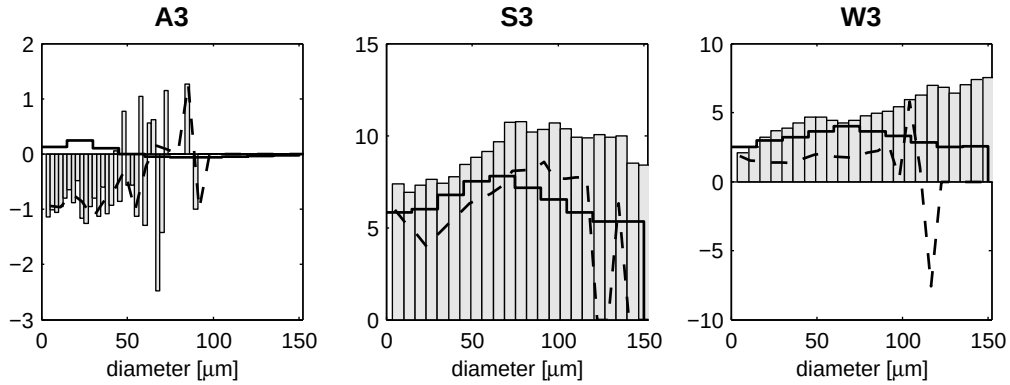
FIGURE 8.21 – Vitesse axiale moyenne en fonction du diamètre à 6, 26 et 56 mm du fond de chambre : expérience (histogramme), FEMM (ligne continue) et EL (ligne discontinue).



(a) 6mm

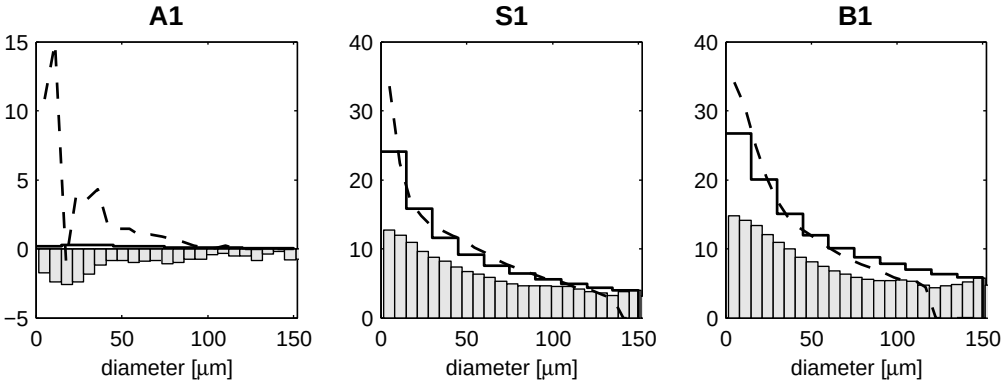


(b) 26mm

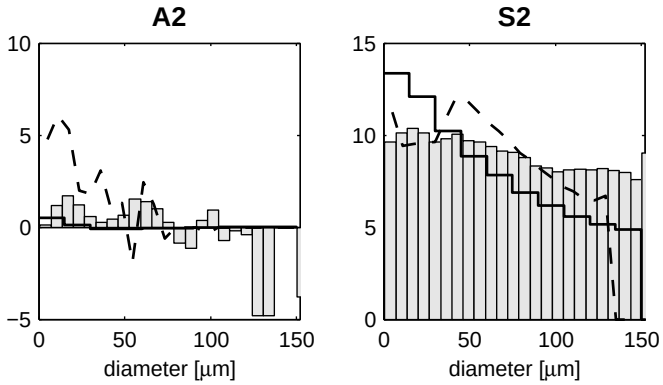


(c) 56mm

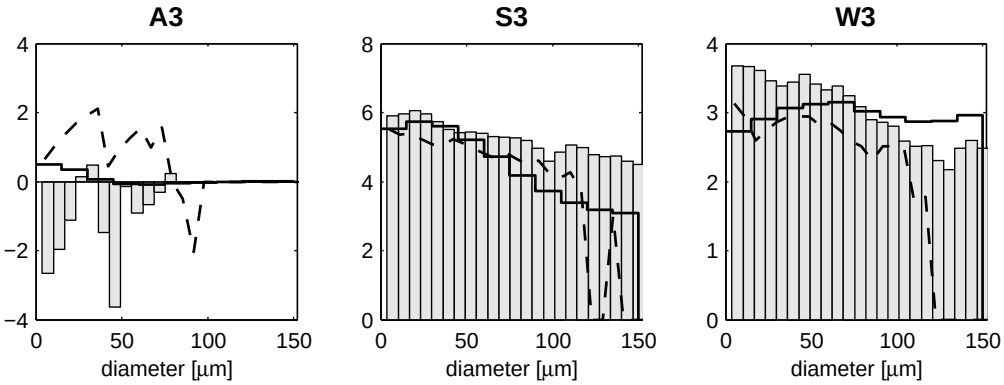
FIGURE 8.22 – Vitesse radiale moyenne en fonction du diamètre à 6, 26 et 56 mm du fond de chambre : expérience (histogramme), FEMM (ligne continue) et EL (ligne discontinue).



(a) 6mm



(b) 26mm



(c) 56mm

FIGURE 8.23 – Vitesse orthoradiale moyenne en fonction du diamètre à 6, 26 et 56 mm du fond de chambre : expérience (histogramme), FEMM (ligne continue) et EL (ligne discontinue).

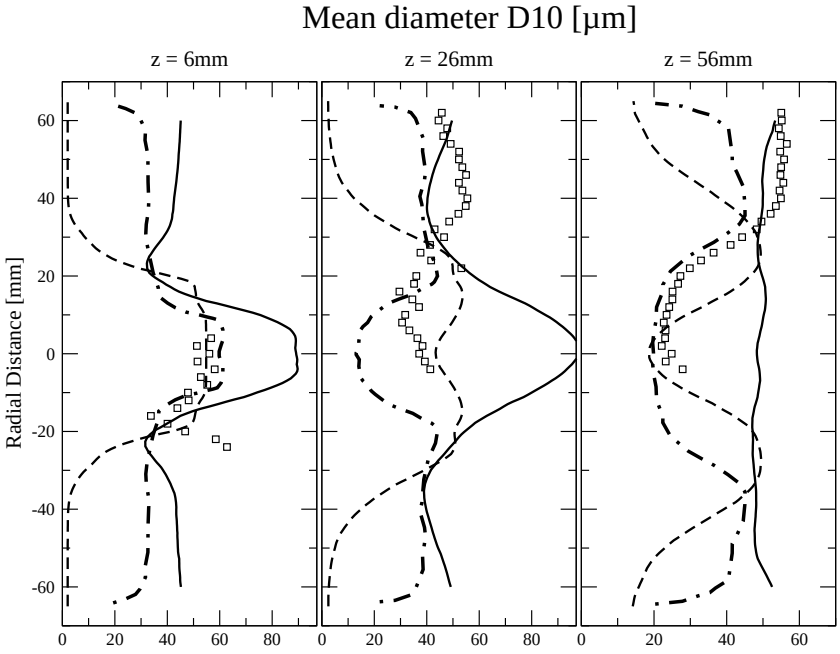


FIGURE 8.24 – Profils de diamètre moyen arithmétique à 6, 26 et 56 mm du fond de chambre : FEMM (ligne continue), FEM (ligne tiretée) et EL (ligne point-tiretée).

8.4.7 Flux volumique de gouttes et fraction massique de kérosène

D'un point de vue de la combustion, il est intéressant de regarder le flux volumique axial de kérosène liquide Φ_l et la fraction massique de kérosène gazeux :

$$\Phi_l(x) = < \alpha_{l,tot}(x) > . < w_{l,tot}(x) > \tag{8.13}$$

Sur la figure 8.25, on compare les flux volumiques prédits par les trois approches. Aucun résultat expérimental n'est disponible pour cette quantité, importante pour l'allumage de la chambre, parce que l'allumage dépend de la richesse locale totale (kérosène en phase gazeuse+liquide).

Le profil à 6 mm montre des répartitions de même forme pour les approches EL et FEMM, mais avec des maximas plus faibles pour l'approche FEMM. L'approche FEM présente une répartition moins large et avec des maximas plus faibles que les deux approches polydisperses. Sur le profil à 26 mm, on remarque que le FEM et l'EL présentent des profils similaires, avec des maximas plus faibles pour l'approche FEM. L'approche FEMM présente des pics plus larges au centre du spray, avec des maximas compris entre ceux prédits par le FEM et l'EL. Sur le profil à 56 mm, l'EL prédit une répartition moins dispersée que les deux approches eulériennes. Les maximas du FEM et de l'EL sont du même ordre, alors que ceux du FEMM sont plus faibles.

Si on s'attend à une différence avec le FEM, il est plus difficile d'expliquer les différences entre le FEMM et l'EL. A 6 mm, cela est sans doute dû à la surestimation de la vitesse axiale moyenne par l'EL, le FEMM l'évaluant correctement. A 26 mm, le maximum plus faible du FEMM par rapport à celui de l'EL est aussi dû à cet effet, mais la différence de flux proche de l'axe serait plutôt une conséquence de la surestimation des grosses gouttes, qui capturent sur l'axe une partie du flux volumique total. Enfin à 56 mm, les résultats semblables entre le FEMM et le FEM proche de l'axe amènent à penser que la diffusion numérique peut en être la cause. La proximité des maximas de flux volumique et de vitesse axiale (figure 8.9) de l'EL et du FEMM montre que les répartitions de liquide prédite par le FEMM et l'EL sont très proches.

La figure 8.26 montre des champs instantanés de fraction massique de kérosène. On remarque que les répartitions prédites par le FEMM et l'EL sont assez semblables, mais différentes de celle prédite par le FEM. En effet, la fraction massique dans la recirculation de coin est beaucoup plus élevée en FEM, où le temps d'évaporation est très court, alors que peu de kérosène a pu être produit dans cette zone en FEMM et EL. Au niveau de la recirculation centrale, on notera aussi la présence de "poches" de fortes fractions massiques, en FEMM et EL, mais pas en FEM. Ces poches sont d'ailleurs beaucoup plus étendues en FEMM qu'en EL. Si on observe le champ prédit par le FEMM, on remarque que les deux "poches" sont liées. On pourrait attribuer la création de cette zone de forte fraction massique aux grosses gouttes sur l'axe. Possédant une grande part du kérosène, elles peuvent créer sur l'axe une zone de forte fraction massique. Plus en aval, cette accumulation est emportée par la recirculation centrale, qui l'étire

et la déchire progressivement.

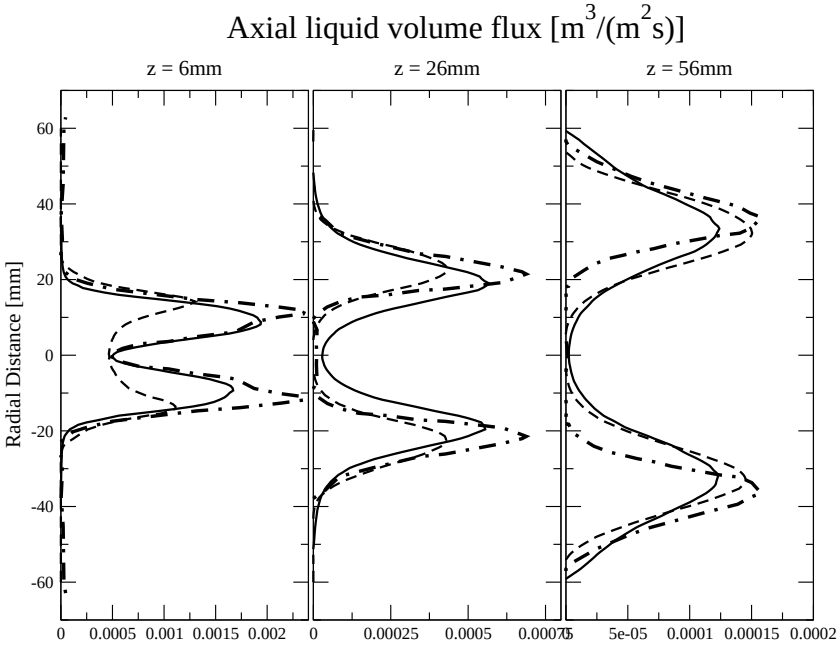


FIGURE 8.25 – Profils de flux de fraction volumique à 6, 26 et 56 mm du fond de chambre : FEMM (ligne continue), FEM (ligne tiretée) et EL (ligne point-tiretée).

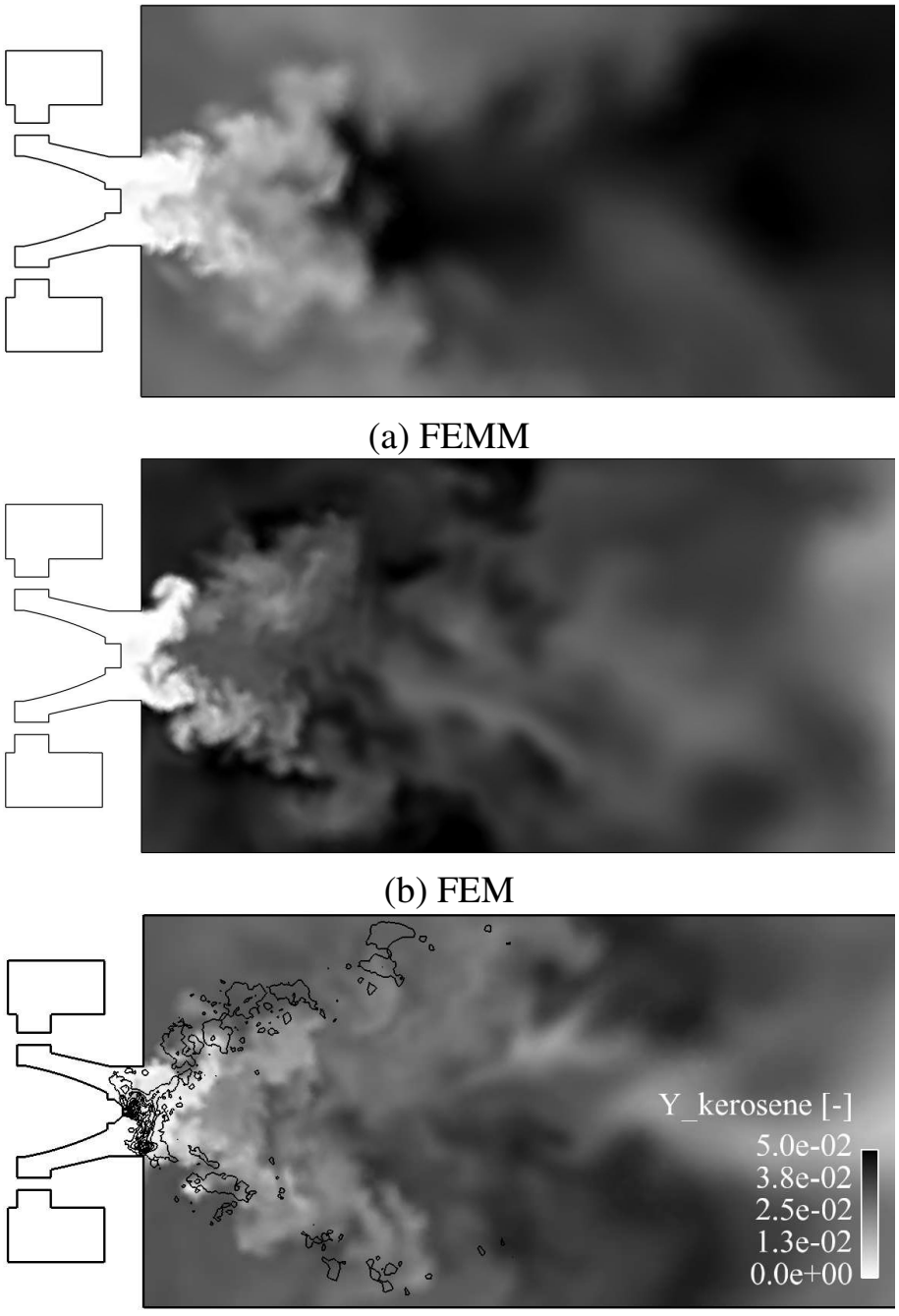


FIGURE 8.26 – Coupe longitudinale de fraction massique de kérosène instantanée : comparaison entre FEMM (a), FEM (b) et EL (c).

8.5 Conclusions

On peut maintenant classer les méthodes selon leur capacité à reproduire les résultats expérimentaux dans trois zones : sur l'axe, dans le spray et à l'extérieur du spray. Le tableau suivant présente ce classement :

Position	Quantité	FEM	EL	FEMM
Sur l'axe	Vitesses moyennes	+ +	- -	-
	RMS	+ +	+	+
	Fdp		+	- -
	Vitesses par taille		-	–
Dans le spray	Vitesses moyennes	+	+	+
	RMS	-	-	+
	Fdp		+	+
	Vitesses par taille		+	+
A l'extérieur du Spray	Vitesses moyennes	- -	+ +	+ +
	RMS	- -	+	+
	Fdp		+ +	+ +
	Vitesses par taille		+	+ +

TABLE 8.2 – Résumé des comparaisons faites entre le FEM, l'EL et le FEMM par rapport à l'expérience : - - accord mauvais - accord passable + accord correct + + accord satisfaisant (les cases grisée signalent la méthode qui donne les meilleurs résultats)

Le FEM, même si il prédit les vitesses moyennes et les RMS de manière correcte, ne peut être qualifié de prédictif sur cette configuration. En effet, comme l'a montré Senoner [2010], un calcul lagrangien monodisperse prédit une répartition de carburant et de liquide différente de celle du calcul polydisperse. Comme ce type de calcul est une simplification d'un calcul lagrangien polydisperse, on peut dire que l'approximation ainsi faite est trop restrictive pour capturer l'écoulement.

Le FEMM et l'EL sont relativement équivalents vis-à-vis de cette configuration, chacun étant supérieur à l'autre pour telle ou telle quantité. Et l'absence de résultats sur les répartitions de liquide et de carburant ne permet pas de trancher. Cependant, le temps de calcul est ici un critère largement à l'avantage de l'EL. En effet, Senoner [2010] a montré qu'un calcul EL demandait un temps de calcul inférieur à un calcul FEM monodisperse. D'après l'annexe A, on peut conclure que le FEMM à 10 sections coûte à peu près 6 fois plus de temps de calcul qu'un calcul FEM. En pratique, le calcul des moyennes sur 200ms pour le FEMM a duré 10 jours sur 160 processeurs opteron du cluster de l'IFP énergies nouvelles. Le temps de calcul est donc largement à l'avantage de l'approche EL.

Conclusions et perspectives

L'objectif de cette thèse s'inscrit dans la continuité des travaux d'amélioration de la prédiction des écoulements turbulents à phase liquide dispersée dans un contexte de simulation aux grandes échelles. Les travaux précédents de Martinez [2010] et Sanjosé [2009] avaient déjà montré l'importance de la modélisation RUM, dans la prédiction de la physique de l'injection pour des configurations de type industriel. L'effort a été ici porté sur la prise en compte de la polydispersion.

La première partie de cette thèse présente la dérivation du nouveau Formalisme Eulérien Mésoscopique Multifluide, permettant grâce à un couplage entre le FEM de Février et al. [2005] et l'approche multifluide de Laurent and Massot [2001] de capturer à la fois les effets polydisperses et ceux dûs à la turbulence du gaz. Les équations du FEM et du FEMM sont dérivées de manière parallèle, afin de bien discerner les points qui diffèrent dans ces deux approches. L'extension de ces deux formalismes à une approche de type LES se fait d'après les travaux de Moreau [2006].

La deuxième partie concerne l'évaluation des stratégies numériques et des modélisations sur des cas tests simples académiques. Les schémas numériques et les senseurs de viscosité artificielle sont détaillés. Une analyse a priori a permis de montrer le comportement des différents senseurs en fonction du degré de non linéarité de la solution. L'évaluation des stratégies numériques PSI, TTGC+senseur JR, et TTGC+senseur CM est faite sur des cas tests de convection 1D à vitesse constante. La méthode TTGC+CM montre ici un avantage flagrant sur les autres stratégies, étant nettement moins diffusive, que ce soit pour une solution initiale gaussienne ou en créneau. Elle montre cependant moins de robustesse que la méthode PSI, définie positive.

La modélisation proposée par le FEMM comporte deux aspects : la modélisation RUM du FEM et la modélisation polydisperse de l'approche multifluide. L'analyse de la modélisation RUM est faite sur le cas test de la Turbulence Homogène Isotrope chargée en particules. Ce cas test canonique permet de maîtriser la turbulence du gaz. La comparaison entre les résultats lagrangiens et les résultats du FEM montre un bon accord entre les deux méthodes. En particulier, la concentration préférentielle et l'énergie du mouvement décorrélé sont bien capturées, indiquant un bon comportement des fermetures de type viscosité sur ce cas test. Ce cas test confirme l'importance de la modélisation RUM pour prendre en compte la dynamique d'une phase dispersée en écoulement turbulent. L'analyse de l'effet du choix du

senseur de viscosité artificielle montre que la stratégie TTGC+CM10 est la plus efficace, étant la moins diffusive.

La modélisation polydisperse proposée par l'approche multifluide est analysée sur deux phénomènes : la traînée et l'évaporation. Le cas test du jet en écoulement transverse permet de bien caractériser les effets de la traînée, fortement conditionnée par la taille des gouttes. Les résultats montrent l'incapacité d'une méthode monodisperse à simuler la répartition spatiale de liquide. L'approche multifluide permet de bien reproduire cette répartition spatiale des gouttes en fonction de leur taille. Cependant des zones de vide apparaissent entre les sections, indiquant que la modélisation des flux décorrélés des moments en taille devient certainement nécessaire à faible nombre de sections.

Le deuxième aspect polydisperse concerne l'évaporation. L'approche multifluide a été initialement proposée pour répondre à ce type de problématique, et le comportement de cette approche est analysé par des cas test déjà utilisés par Laurent [2006] et Dufour [2005]. L'analyse porte ici sur l'approche multifluide d'ordre 1 utilisée dans les travaux de de Chaisemartin [2009] et l'approche multifluide d'ordre 2 proposée dans cette thèse. Les résultats montrent un comportement numérique très stable de la méthode d'ordre 1. La comparaison des erreurs globales montre clairement l'avantage des méthodes d'ordre 2. Mais la robustesse du premier ordre amène à utiliser cette méthode pour l'application finale de cette thèse.

La dernière partie de ce travail concerne l'application du FEMM à la configuration MERCATO. Cette configuration aéronautique de l'ONERA dispose de nombreux diagnostics optiques sur la phase liquide, et permet donc une comparaison expérience/calcul très approfondie. Elle a déjà été étudiée dans les travaux de Lamarque [2007], Roux [2009], Sanjosé [2009] et Senoner [2010]. La nouveauté du calcul proposé ici consiste en l'utilisation d'un formalisme eulérien polydisperse. Les résultats du calcul monophasique montrent une bonne reproduction de l'écoulement gazeux, même si les RMS de vitesse sont sous-estimés.

Le calcul FEMM est analysé sur plusieurs fronts. La première étape consiste en l'étude de la topologie de l'écoulement. Les résultats montrent que le FEMM capture une physique bien différente pour chaque section, montrant tout l'intérêt de sectionner l'espace des tailles pour reproduire de tels écoulements. Les comportements sont bien cohérents avec le nombre de Stokes, les petites gouttes étant fortement couplées à la phase gazeuse et possédant peu d'énergie décorrélée, les grosses gouttes étant faiblement couplées au gaz et possédant beaucoup d'énergie décorrélée. Les champs moyens de fraction volumique obtenus par le FEMM et l'approche EL sont très similaires, avec une phase liquide qui subsiste dans toute la chambre. Le FEM décrit une phase liquide avec une durée de vie très courte, cette dernière n'existant plus après avoir impacté la paroi. Cela montre l'importance de la polydispersion sur la prédiction de la répartition spatiale de liquide.

Les vitesses moyennes obtenues sur les trois traversées sont en bon accord avec les expériences de

Garcia-Rosa [2008] pour les trois approches, avec cependant une meilleure capture de la zone externe du spray pour les approches FEMM et EL. Par contre, les RMS de vitesse sont sous-estimées par le FEM pour toutes les composantes. Les résultats obtenus avec le FEMM sont en meilleur accord avec l'expérience que l'EL pour les composantes axiales et radiales, mais le FEMM ne capture par la forme des profils pour la composante orthoradiale, alors que l'EL en est capable. Cette analyse des écarts-types se base cependant sur une hypothèse d'isotropie de la composante décorrélée, et une analyse plus fine nécessiterait de qualifier la structure réelle de cette vitesse.

L'analyse des fonctions densité de probabilité montre un accord très intéressant entre les approches FEMM et EL. Cependant le FEMM surestime la présence des grosses gouttes, notamment sur l'axe central de la chambre de combustion, alors que l'EL la sous-estime. La comparaison avec l'expérience est bonne sur la majorité des points de mesures, sauf sur les deux points les plus proches de l'injecteur, où le maximum de probabilité est décalé vers les gros diamètres pour le FEMM et l'EL. Les profils de diamètre arithmétique confirment ces tendances, le FEMM surestimant cette quantité alors que l'EL et le FEM la sous-estime. Les vitesses par classe de gouttes sont aussi en bon accord entre le FEMM et l'EL pour toutes les composantes, avec globalement une surestimation de la vitesse par rapport à l'expérience pour les points à 6mm du fond de chambre et une sous-estimation pour les points à 26 et 56mm.

Finalement les fractions massiques de kérosène montre des répartitions équivalentes pour le FEMM et l'EL, alors que le FEM surestimerait la quantité de kérosène dans la zone de recirculation de coin, et la sous-estimerait dans la recirculation centrale. Les flux volumiques de gouttes sont sensiblement différents pour les trois approches. Pour départager les deux méthodes polydisperses, le FEMM et l'EL, il manque donc des résultats expérimentaux de répartition de liquide et fraction massique de fuel. Le FEM peut être écarté des modélisations prédictives, celui-ci représentant une simplification de la physique par rapport au FEMM. Senoner [2010] a d'ailleurs déjà montré que l'hypothèse de monodispersion à l'injection pour l'EL conduisait à des résultats similaires à ceux obtenus en FEM.

Les travaux réalisés dans cette thèse ont permis d'intégrer et de valider un premier formalisme eulérien qui permet de prendre en compte à la fois les effets de la turbulence et de la polydispersion : le Formalisme Eulérien Mésoscopique Multifluide. Les évaluations des stratégies numériques ont montré l'importance des méthodes numériques dans la simulation eulérienne. Le FEMM a été appliqué avec succès sur l'application aéronautique MERCATO, capturant de nouvelles dynamiques par rapport au FEM, et reproduisant des effets polydisperses similaires à ceux obtenus en lagrangien. La comparaison à l'expérience est elle aussi améliorée par rapport au FEM. La modélisation nécessite cependant beaucoup de nouveaux développements.

La simulation robuste avec de tels formalismes impose de nouveaux schémas numériques, comme les schémas cinétiques utilisés dans les travaux de de Chaisemartin [2009] ou encore les schémas à relaxation proposés récemment par Boileau et al. [2010]. La prise en compte précise des écoulements

cisaillés caractéristiques des situations d'injection de carburant nécessite une modélisation RUM plus aboutie, comme proposé dans les travaux de Masi [2010].

Finalement, le modèle eulérien qui serait le plus apte à simuler un écoulement où les effets polydisperses sont prépondérants se situe certainement entre tous les modèles existants. Entre l'approche multifluide de premier ordre à plusieurs sections de Laurent et al. [2004] et l'approche multi-moments à une section de Kah [2010], la première permettant de capturer les effets de traînée naturellement, la seconde reproduisant l'évaporation très efficacement. Le couplage de tels modèles avec des approches du type FEM imposera la modélisation des termes de flux décorrélé des moments en taille, absent de la modélisation au premier ordre (voir chapitre 2.4). Tout ceci devra s'accompagner de la prise en compte de phénomènes physiques nouveaux, comme l'atomisation secondaire (Dufour [2005]) ou les collisions (Laurent [2002]), prépondérants dans les cas d'injection des moteurs automobiles.

Bibliographie

M. Abbas. *Auto-diffusion de particules dans un écoulement cisaillé : Des interactions hydrodynamiques aux effets collisionnels*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2008.

B. Abramzon and W. A. Sirignano. Droplet vaporisation model for spray combustion calculations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 9 :1605–1618, 1989.

E. Babinsky and P. Sojka. Modeling drop size. *Progress in Energy and Combustion Science*, 28 :303–329, 2002.

S. Balachandar. A scaling analysis for point-particle approaches to turbulent multiphase flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 35 :801–810, 2009.

C. Baumgarten. *Mixture formation in internal combustion engines*. Springer-Verlag Berlin and Heidelberg GmbH & Co. K, 2006.

R. Belt and O. Simonin. Quadrature method of moments for the pdf modeling of droplet coalescence in turbulent two-phase flow. In *Proceedings of the ASME FEDSM 2009*, 2009.

A. Boelle. *Validation d'un modèle à deux fluides appliqué à la simulation des lits fluidisés denses*. PhD thesis, EDF-DRD, 1999.

J. Bohbot, N. Gillet, and A. Benkenida. IFP-C3D : an unstructured parallel solver for reactive compressible gas flow with spray. *Oil & Gas Science and Technology*, 64(3) :309–335, 2009.

M. Boileau. *Simulations aux grandes échelles de l'allumage diphasique des foyers aéronautiques*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2007.

M. Boileau, C. Chalons, J.-F. Bourgouin, C. Terrier, and F. Laurent. Robust numerical schemes for eulerian spray DNS and LES in two-phase turbulent flows. In *International Conference on Multiphase Flow 2010*, 2010.

F. Bouchut, S. Jin, and X. Li. Numerical approximations of pressureless and isothermal gas dynamics. *SIAM J. Num. Anal.*, 41 :135–158, 2003.

C. Chalons and J.-F. Coulombel. Relaxation approximation of the euler equations. *J. Math. Anal. Appl.*, 348(2) :872–893, 2008.

G. Chanteperdrix, P. Villedieu, and J. Vila. A compressible model for separated two-phase flows computations. In *ASME Fluids Engineering Division Summer Meeting*, Montreal, 2002.

P. Chassaing. *Turbulence en mécanique des fluides : Analyse du phénomène en vue de sa modélisation à l'usage de l'ingénieur*. Cépaduès-éditions, 2000.

O. Colin. *Simulations aux grandes échelles de la combustion turbulente prémélangée dans les statoréacteurs*. PhD thesis, INP Toulouse, 2000.

O. Colin and M. Rudgyard. Development of high-order taylor-galerkin schemes for LES. *Journal of Computationnal Physics*, 162(2) :338–371, 2000.

S. de Chaisemartin. *Modèles eulériens et simulation de la dispersion turbulente de brouillards qui s'évaporent*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 2009.

S. de Chaisemartin, L. Freret, D. Kah, F. Laurent, R. Fox, J. Reveillon, and M. Massot. Eulerian models for turbulent spray combustion with polydispersity and droplet crossing : modeling and validation. *Center of Turbulence Research - Proceedings of the summer program*, 2008.

S. de Chaisemartin, L. Freret, D. Kah, F. Laurent, R. Fox, J. Reveillon, and M. Massot. Eulerian models for turbulent spray combustion with polydispersity and droplet crossing. *Compte-rendus mécanique*, 337 :438–448, 2009b.

O. Desjardins, M. V., and H. Pitsch. An accurate conservative level set/ghost fluid method for simulating turbulent atomization. *Journal of Computational Physics*, 227(18) :8395–8416, 2008.

P. Desjonqueres, G. Gouesbet, A. Berlemont, and A. Picart. Dispersion of discrete particles by continuous turbulent motions : new results and discussions. *Physics of Fluid*, 29 :2147–2151, 1986.

H. Dette and W. Studden. *The Theory of Canonical Moments with Applications in Statistics*. Wiley, New York, 1997.

D. Drew and S. Passman. Theory of multicomponent fluids, 1999.

G. Dufour. *Modélisation multi-fluide eulérienne pour les écoulements diphasiques à inclusions dispersées*. PhD thesis, Université Toulouse III, 2005.

G. Dufour and P. Villedieu. A second-order multi-fluid model for evaporating sprays. *Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 39(5) :931–963, 2005.

J. Dukowicz. A particle-fluid numerical model for liquid sprays. *Journal of Computational Physics*, 35 : 229–253, 1980.

A. Dulbecco. *Modeling of diesel HCCI combustion and its impact on pollutant emissions applied to global engine system simulation*. PhD thesis, Université de Toulouse, 2010.

S. Elgobashi and G. Truesdell. Direct simulation of particle dispersion in a decaying isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 242 :655–700, 1992.

S. Elgobashi and G. Truesdell. On the two-way interaction between homogeneous turbulence and dispersed solid particles. *Physics of Fluids*, 5(7) :1790–1801, 1993.

A. Ferrante and S. Elghobashi. On the physical mechanisms of two-way coupling in particle-laden isotropic turbulence. *Physics of Fluids*, 15(2) :315–329, 2003.

P. Février, O. Simonin, and K. D. Squires. Partitioning of particle velocities in gas-solid turbulent flow into a continuous field and a spatially uncorrelated random distribution : theoretical formalism and numerical study. *Journal of Fluid Mechanics*, 533 :1–46, 2005.

R. Fox, F. Laurent, and M. Massot. Numerical simulation of spray coalescence in an eulerian framework : Direct quadrature method of moments and multi-fluid method. *Journal of Computational Physics*, 227 :3058–3088, 2008.

J. Galpin. *Modélisation LES de la combustion avec une prise en compte des effets de la cinétique détaillée et en perspective d'applications moteurs*. PhD thesis, INSA Rouen, 2007.

J. Galpin, A. Naudin, L. Vervisch, C. Angelberger, O. Colin, and P. Domingo. Large-eddy simulation of a fuel-lean premixed turbulent swirl-burner. *Combustion and Flame*, 155(1-2) :247–266, 2008.

M. Garcia. *Development and validation of the Euler-Lagrange formulation on a parralel and unstructured solver for large-eddy simulation*. PhD thesis, Université Toulouse III, 2009.

N. Garcia-Rosa. *Phénomènes d'allumage d'un foyer de turbomachine en conditions de haute altitude*. PhD thesis, Université Toulouse III, 2008.

GIEC. Bilan 2007 des changements climatiques. contribution des groupes de travail I, II et III au quatrième rapport d'évaluation du groupe d'experts intergouvernemental sur l'évolution du climat. Technical report, GIEC, Genève, Suisse, 2007.

R. Gordon. Error bounds in equilibrium statistical mechanics. *Journal of Mathematical Physics*, 9 : 655–663, 1968.

M. Gorokhovski. The stochastic lagrangian model of drop breakup in the computation of liquid sprays. *Atomization and Sprays*, 11 :505–519, 2001.

M. Gorokhovski and M. Hermann. Primary atomizing modeling. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 40 :343–366, 2008.

C. Gourdel. *Modélisation et simulations de mélanges binaires de particules en interaction avec un champ fluide turbulent pour l'application aux lits fluidisés circulants*. PhD thesis, Université de Technologie de Compiègne, 1999.

J. Greenberg, S. I., and T. Y. On the origin of spray sectional conservation equations. *Combustion and Flame*, 93 :90–96, 1993.

C. Habchi. Projet sigle : Livrable de la tâche 1.1 modélisation des conditions aux limites d'injection dans le contexte de l'approche diphasique lagrangienne. Technical Report 60623, IFP, 2008.

J. Hinze. *Turbulence*. McGraw-Hill, New-York, 2005.

K. Hishida, K. Takemoto, and M. Maeda. Turbulent characteristics of gas-solids two-phase confined jet : Effect of particle density. *Japanese Journal of Multiphase Flow*, 1(1) :56–69, 1987.

G. Hubbard, V. Denny, and A. Mills. Droplet evaporation : effects of transient and variable properties. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 18 :1003–1008, 1975.

F. Jaegle. *Large eddy simulation of evaporating sprays in complex geometries using Eulerian and Lagrangian methods*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2009.

D. Kah. *Prise en compte des aspects polydispersés pour la modélisation d'un jet de carburant dans les moteurs à combustion interne*. PhD thesis, Ecole Centrale de Paris, 2010.

D. Kah, F. Laurent, M. Massot, and S. Jay. Modeling of polydisperse sprays using a high order method for numerical advection of size moments. In *ICLASS2009*, 2009.

A. Kaufmann, O. Simonin, and T. Poinsot. Direct numerical simulation of particle-laden homogeneous isotropic turbulent flows using a two-fluid model formulation. In *5th International Conference on Multiphase Flow, ICMF'04*, 2004.

A. Kaufmann, M. Moreau, O. Simonin, and J. Helie. Comparison between lagrangian and mesoscopic eulerian modelling approaches for inertial particles suspended in decaying isotropic turbulence. *Journal of Computational Physics*, 227 :6448–6472, 2008.

K. Kuo. *Principles of Combustion*. Wiley-Interscience, New York, 2^{nd} edition, 2005.

O. Laget, B. Reveille, C. Habchi, L. Martinez, K. Kruffin, and C. Angelberger. LES calculations of a four cylinder engine. In *SAE Detroit 2011*, 2011.

N. Lamarque. *Schémas numériques et conditions limites pour la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique dans les foyers d'hélicoptère*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2007.

F. Laurent. *Modélisation mathématique et numérique de la combustion de brouillards de gouttes polydispersés*. PhD thesis, Université Claude Bernard - Lyon 1, 2002.

F. Laurent. Numerical analysis of eulerian multi-fluid models in the context of kinetic formulations for dilute evaporating sprays. *Mathematical Modeling and Numerical Analysis*, 3 :431–468, 2006.

F. Laurent and M. Massot. Multi-fluid modeling of laminar poly-dispersed spray flames : origin, assumptions and comparison of sectional and sampling methods. *Combustion Theory and Modelling*, 5 :537–572, 2001.

F. Laurent, M. Massot, and P. Villedieu. Eulerian multi-fluid modeling for the numerical simulation of coalescence in polydisperse dense liquid sprays. *Journal of Computational Physics*, 194 :505–543, 2004.

G. Lecocq. *Approches hybrides combinant chimie complexe, description statistique et densité de surface de flamme pour la simulation aux grandes échelles de l'auto-inflammation, l'allumage par bougie et la flamme de prémélange dans les moteurs à allumage commandé*. PhD thesis, INSA Rouen, 2010a.

G. Lecocq, S. Richard, and L. Vervisch. Gradient and counter-gradient modeling in premixed flames : Theoretical study and application to the les of a lean premixed turbulent swirl-burner. *Combustion, Science and Technology*, 4(6) :465–479, 2010b.

J. Luche. *Elaboration of reduced kinetics models of combustion. Application to a kerosene mechanism*. PhD thesis, LCSR Orléans, 2003.

T. Lund and M. Rogers. An improved measure of strain state probability in turbulent flows. *Physics of Fluids*, 6(5) :1838–1847, 1994.

D. Marchisio and R. Fox. Solution of population balance equations using the direct quadrature method of moments. *Journal of Aerosol Science*, 36 :43–73, 2005.

D. Marchisio, J. Pikturna, R. Fox, and V. R.D. Quadrature method of moments for population-balance equations. *AIChE Journal*, 49(5) :1266–1276, 2003.

L. Martinez. *Simulation aux grandes échelles de l'injection de carburant liquide dans les moteurs à combustion interne*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2010.

L. Martinez, A. Vie, S. Jay, A. Benkenida, and B. Cuenot. Large eddy simulation of fuel sprays using the eulerian mesoscopic approach. validations in realistic engine conditions. In *ICLASS2009*, 2009.

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.

E. Masi. *Etude théorique et numérique de la modélisation Eulérienne instationnaire des écoulements turbulents anisothermes gaz-particules*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2010.

E. Masi, B. Bédat, M. Moreau, and O. Simonin. Euler-Euler large eddy simulation approach for non isothermal particle-laden turbulent jet. In *Proceedings of FEDSM2008*, 2008.

E. Masi, E. Riber, p. Sierra, O. Simonin, and L. Gicquel. Modeling the random uncorrelated velocity stress tensors for unsteady particle eulerian simulation in turbulent flows. In *International Conference on Multiphase Flow 2010*, 2010.

A. Massol. *Simulations numeriques d'écoulements a travers des réseaux fixes de sphères monodisperses et bidisperses, pour des nombres de reynolds modérés*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2003.

M. Massot. Eulerian multi-fluid models for polydisperse evaporating sprays. *International Center for Mechanical Sciences - Courses and Lecture Series*, 492, 2007.

M. Massot, R. Knikker, C. Péra, and J. Réveillon. Lagrangian/eulerian analysis of the dispersion of evaporating droplets in a non-homogeneous turbulent flow. In *International Conference on Multiphase Flow 2004*, 2004.

M. Massot, F. Laurent, D. Kah, and S. de Chaisemartin. A robust moment method for evaluation of the disappearance rate of evaporating sprays, 2010.

G. Mauviot. *Développement d'une modélisation phénoménologique des chambres de combustion de moteurs à piston par réduction de modèles physiques 3D dans la perspective d'une intégration dans un outil de simulation système.* PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie, 2006.

M. Maxey and B. Patel. Localized force representations for particles sedimenting in stokes flow. *International Journal of Multiphase Flow*, 27 :1603–1626, 2001.

M. Maxey and J. Riley. Equation of motion for a small rigid sphere in a non uniform flow. *Physics of Fluids*, 26(4) :2883–2889, 1983.

R. McGraw. Description of aerosol dynamics by the quadrature method of moments for aggregation-breakage processes. *Aerosol Sciences and Technologies*, 27 :255–265, 1997.

J. Michel. *Modélisation de la combustion turbulente d'un mélange hétérogène en auto-inflammation en vue de l'application à la simulation des moteurs Diesel*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 2008a.

J. Michel, O. Colin, and D. Veynante. Modeling ignition and chemical structure of partially premixed turbulent flams using tabulated chemistry. *Combustion and Flame*, 152(1-2) :80–99, 2008b.

J. Michel, O. Colin, and D. Veynante. Comparison of differing formulations of the PCM model by their application to the simulation of an auto-igniting H2/air jet. *Flow, Turbulence and Combustion*, 83(1) : 33–60, 2009a.

J. Michel, O. Colin, C. Angelberger, and D. Veynante. Using the tabulated diffusion flamelet model ADF-PCM for simulating a lifted methane-air jet flame. *Combustion and Flame*, 156(7) :1318–1331, 2009b.

M. Moreau. *Modélisation numérique directe et des grandes échelles des écoulements turbulents gaz-particules dans le formalisme eulérien mésoscopique*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2006.

M. Moreau, B. Bédat, and O. Simonin. Development of gas-particle euler-euler LES approach : a priori analysis of particle sub-grid models in homogeneous isotropic turbulence. *Flow Turbulence and Combustion*, 84(2) :295–324, 2010.

J. Mossa. *Extension polydisperse pour la description Euler-Euler des écoulements diphasiques réactifs*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2005.

V. Moureau. *Simulation aux grandes échelles de l'aérodynamique interne des moteurs à pistons*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris / IFP Rueil-Malmaison, France, 2004.

V. Moureau, I. Barton, C. Angelberger, and T. Poinsot. Towards LES in IC engines : simulations of a compressed tumble flow. *SAE*, paper N°2004-01-1995, 2004b.

V. Moureau, G. Lartigue, Y. Sommerer, C. Angelberger, O. Colin, and T. Poinsot. Numerical methods for unsteady compressible multi-component reacting flows on fixed and moving grids. *Journal of Computational Physics*, 202 :710–736, 2005.

A. Murrone and H. Guillard. A five equation reduced model for compressible two phase flow problems. *Journal of Computational Physics*, 205 :664–698, 2005.

T. Ménard, 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(5) :510–524, 2007.

F. Nicoud and F. Ducros. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient. *Flow Turbulence and Combustion*, 62(3) :183–200, 1999.

T. Passot and A. Pouquet. Numerical simulation of compressible homogeneous flows in turbulent regime. *Journal of Fluid Mechanics*, 181 :441–466, 1987.

T. Poinsot and S. Lele. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *Journal of Computational Physics*, 101(1) :104–129, 1992.

W. Ranz and W. Marshall. Evaporation from drops. *Chem. Eng. Prog.*, 48(4) :173, 1952.

M. Reeks. On a kinetic equation for the transport of particles in turbulent flows. *Physics of Fluids*, 3 : 446–456, 1991.

M. Reeks. On the probability density function equations for particle dispersion in a uniform shear flow. *Journal of Fluid of Mechanics*, 522 :263–302, 2005.

B. Reveille, A. Kleeman, and S. Jay. Towards even cleaner diesel engines : Contribution of 3D cfd tools. *Oil & Gas Science and Technology*, 2006.

J. Réveillon, M. Massot, and C. Péra. Analysis and modelling of the dispersion of vaporizing polydispersed sprays in turbulent flows. *Center of Turbulence Research - Proceedings of the summer program*, 2002.

E. Riber. *Développement de la méthode de simulation aux grandes échelles pour les écoulements diphasiques turbulents*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2007.

E. Riber, M. Moreau, O. Simonin, and B. Cuenot. Development of Euler-Euler LES approach for gas-particle turbulent jet flow. In *FEDSM2006*, 2006.

S. Richard. *Simulation aux grandes échelles de la combustion dans les moteurs à allumage commandé.* PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 2005.

S. Richard, O. Colin, O. Vermorel, A. Benkenida, C. Angelberger, and D. Veynante. Towards large eddy simulation of combustion in spark ignition engines. In *Proc. of the Combustion Institute*, volume 31, pages 3059–3066, 2007.

F. Roos and W. Wilmarth. Some experimental results on sphere and disk drag. *AIAA Journal*, 1971.

A. Roux. *Simulation aux grandes échelles d'un statoréacteur*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2009.

U. Saffmann. On the stability of laminar flow of a dusty gas. *Journal of Fluid Mechanics*, 13(1) : 120–128, 1962.

M. Sanjosé. *Évaluation de la méthode Euler-Euler pour la simulation numérique aux grandes échelles des chambres à carburant liquide*. PhD thesis, Université de Toulouse, 2009.

M. Sanjosé, T. Lederlin, L. Gicquel, B. Cuenot, H. Pitsch, N. Garcia-Rosa, R. Lecourt, and T. Poinsot. LES of turbulent reacting flows. *Center of Turbulence Research - Proceedings of the summer program*, 2008.

S. Sazhin. Advanced models of fuel droplet heating and evaporation. *Progress in Energy and Combustion Sciences*, 32 :162–214, 2006.

L. Schiller and A. Nauman. A drag coefficient correlation. *VDI Zeitung*, 77 :318–320, 1935.

L. Schneider, N. Le Lostec, P. Villedieu, and A. Sadiki. A moment method for splashing and evaporation processes of polydisperse sprays. *Progress in Energy and Combustion Sciences*, 36 :261–272, 2010.

J. Senoner. *Simulations aux grandes échelles de l'écoulement diphasique dans un brûleur aéronautique par une approche Euler-Lagrange*. PhD thesis, Université de Toulouse, 2010.

J. Senoner, M. Sanjosé, B. Cuenot, and T. Poinsot. A methodology to model fuel injection by pressure-swirl atomizer for large eddy simulation of real combustion chamber. *to be submitted to American Institute of Aeronautics and Astronautics Journal*, 2009a.

J. Senoner, T. Sanjosé, M. Lederlin, F. Jaegle, M. Garcia, E. Riber, B. Cuenot, L. Gicquel, H. Pitsch, and T. Poinsot. Eulerian and lagrangian large eddy simulations of an evaporating two-phase flow. *Compte rendu de l'Académie des Sciences*, 337(6-7) :458–468, 2009b.

D. Sidilkover and P. Roe. Unification of some advection schemes in two dimensions. Technical Report ICASE No95-10, NASA, 1995.

O. Simonin. Combustion and turbulence in two phase flows. lecture series 1996-02, 1996.

O. Simonin, L. Zaichik, V. Alipchenkov, and P. Février. Connection between two statistical approaches for the modelling of particle velocity and concentration distributions in turbulent flow : The mesoscopic eulerian formalism and the two-point probability density function method. *Physics of Fluids*, 18(12) :125107, 2006.

P. Simonin, O. Fevrier and J. Lavieville. On the spatial distribution of heavy particle velocities in turbulent flow : from continuous field to particulate chaos. *Journal of Turbulence*, 3(1) :40, 2002.

J. Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations. i : The basic experiment. *Monthly Weather Review*, 91(3) :99–164, 1963.

D. B. Spalding. The combustion of liquid fuels. In *Proceedings of the 4th Symp. (International) on Combustion, The Comb. Institute*, pages 847–864, Baltimore, 1953.

O. Vermorel, B. Bédat, O. Simonin, and T. Poinsot. Numerical study and modelling of turbulence modulation in a particle laden slab flow. *Journal of Turbulence*, 335 :75–109, 2003.

O. Vermorel, S. Richard, O. Colin, C. Angelberger, and A. Benkenida. Multi-cycle LES simulations of flow and combustion in a PFI SI 4-valve production engine. *Combustion and Flame*, 2009.

P. Versaevel. *Combustion laminaire diphasique : Etude théorique et expérimentale*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 1996.

R. Vichnevetsky and J. Bowles. Fourier analysis of numerical approximations of hyperbolic equations. Philadelphia, 1982.

A. Vié and C. Habchi. Projet sigle : Livrable de la tâche 2.1 méthodologie de simulation de l'injection directe essence pour un calcul LES dans le formalisme eulérien mésoscopique. Technical Report 60623, IFP, 2008.

A. Vié, L. Martinez, S. Jay, A. Benkenida, and B. Cuenot. Validation of the eulerian mesoscopic approach in particle-charged homogeneous isotropic decaying turbulence in the scope of large eddy simulation of fuel sprays. In *ICLASS2009*, 2009.

A. Vié, S. Jay, B. Cuenot, and M. Massot. Accounting for polydispersion in the eulerian large eddy simulation of an aeronautical-type configuration. *To be submitted to Flow Turbulence and Combustion*, 2010a.

A. Vié, M. Sanjosé, S. Jay, B. Cuenot, and M. Massot. Evaluation of a multifluid mesoscopic eulerian formalism on the large eddy simulation of an aeronautical-type configuration. In *International Conference on Multiphase Flow 2010*, 2010b.

J. von Neumann and R. D. Richtmeyer. A method for the numerical calculation of hydrodynamic shocks. *Journal of Applied Physics*, 21 :231, 1950.

D. Wright. Numerical advection of moments of the particule size distribution in eulerian models. *Journal of Aerosol Science*, 38(3) :352–369, 2007.

D. Wunsch, R. Belt, P. Fede, and O. Simonin. DNS/DPS of inertial droplet coalescence in homogeneous isotropic turbulence and comparison with pdf model predictions using the direct quadrature method of moments. In *Proceedings of the ASME FEDSM 2009*, 2009.

K. Yeo, S. Dong, E. Climent, and M. Maxey. Modulation of homogeneous turbulence seeded with finite size bubbles or particles. *International Journal of Multiphase Flow*, 36 :221–233, 2010.

A. Yoshizawa. Statistical theory for compressible turbulent shear flows, with the application to subgrid modelling. *Physics of Fluids*, 29(7) :2152–2164, 1986.

ANNEXES

Annexe A

Performances de AVBP multiclasse

L'implémentation du module multi-fluide dans AVBP a nécessité un profond remaniement du code pour permettre de prendre en compte plusieurs sections ou classes de la phase liquide. Le calcul associé soulève donc la question de la performance des calculs multi-classes par rapport aux calculs monodisperses. Le temps d'un calcul multi-fluide est très proche d'un calcul multi-classe, étant donné que la seule différence est une routine supplémentaire pour l'évaporation. On parlera donc ici de classes pour le liquide. On se propose d'évaluer cette performance sur le cas test de la THI présenté dans le chapitre 4. Les calculs sont effectués sur le cluster de l'IFP. Il est composé de 114 noeuds de calcul possédant chacun 4 processeurs quadri-coeurs AMD opteron barcelona 8356 cadencés à 2.3ghz. Ces processeurs possèdent 4x512ko de cache L2, et 2Mo de cache L3.

On analyse ici les effets de deux paramètres : le nombre de classes et le ncgroup, qui est un paramètre fixé par l'utilisateur dans AVBP, et permet de grouper des séries de calculs sur les cellules avant de les envoyer aux processeurs : plutôt que d'envoyer les cellules une par une, ou toutes d'un coup, on choisit de les envoyer par petits paquets, pour optimiser l'utilisation de la mémoire cache du processeur. L'importance du choix de ce paramètre est connue, et ses effets dépendent du cas utilisé, du nombre de modèles activés (qui fait varier la quantité de calculs par cellule), et surtout du processeur utilisé. Ils ne dépendent cependant pas du nombre de processeurs utilisés. On ne s'intéresse pas ici à la performance parallèle du code, considérant que le rapport entre les communications et les calculs de chaque processeur ne change pas avec le nombre de sections.

On définit l'efficacité réduite :

$$E = T.\frac{N_{proc}}{N_{cell} * N_{ite}} \tag{A.1}$$

où T est le temps de calcul. L'efficacité réduite est tracée sur la Fig. A.1 en fonction du nombre de classes, pour trois ncgroup différents. On remarque qu'à ncgroup=5, l'augmentation de l'efficacité réduite est proportionnelle au nombre de classes dans le calcul. Cela confirme un bon comportement du code en fonction du nombre de classes. Cependant, pour des ncgroup supérieurs (ici 40 et 90), l'augmentation n'est plus linéaire. La figure A.2 confirme ce comportement, où l'efficacité réduite en fonction du

ncgroup, pour 0, 1, 5, et 10 classes est tracée. On remarque qu'à 0 et 1 classes, le temps de calcul varie peu avec le ncgroup, alors qu'à 5 et 10 classes, le temps de calcul varie fortement, rendant nécessaire une optimisation du paramètre. En pratique, il semble que le nombre d'équation à résoudre par cellule est tellement important que la stratégie de groupage des cellules ne soit pas optimale, et qu'une approche séquentielle est préférable.

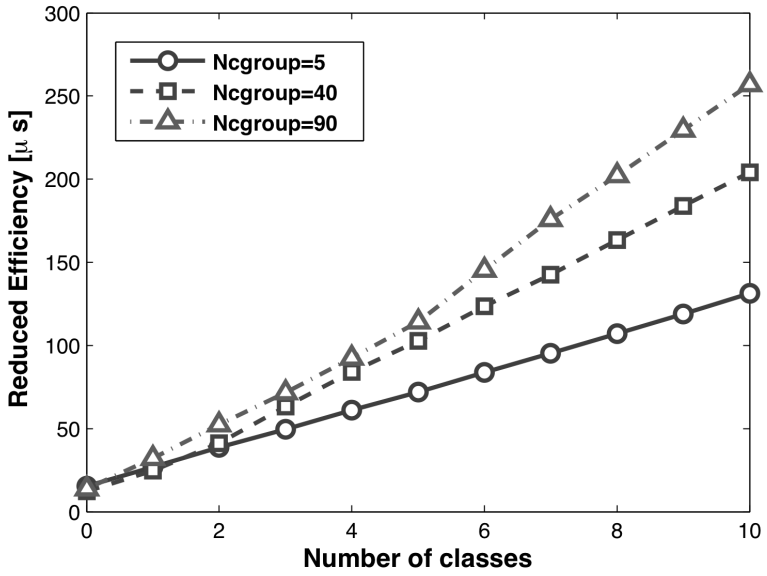


FIGURE A.1 – Efficacité réduite en fonction du nombre de classes pour un ncgroup de 5 (cercles), 40 (carrés) et 90 (triangles), obtenue sur 16 processeurs AMD Opteron Barcelona 8356 à 2.3 ghz.

Pour évaluer l'influence des processeurs sur l'optimisation du cache, on effectue le même test sur 4 processeurs Intel Xeon W3520 cadencés à 2.66ghz, et ayant 4x256ko de cache L2 et 8Mo de cache L3. Ces processeurs sont intrinsèquement plus puissants que les processeurs utilisés précédemment. La figure A.3 montre l'efficacité réduite en fonction du nombre de classes pour différents ncgroup. La puissance supérieure de ces processeurs conduit à un facteur 2 sur l'efficacité réduite. L'augmentation de l'efficacité réduite reste ici relativement linéaire pour tous les ncgroup, même si le coût par classe augmente avec le ncgroup.

D'après la figure A.4, on remarque que l'effet du ncgroup sur l'efficacité réduite est en effet beaucoup moins important qu'avec les opteron, et ce quel que soit le nombre de classe. L'augmentation de l'efficacité entre ncgroup=5 et ncgroup=90 pour un calcul à 10 classes est seulement de 30%, alors qu'elle était de 92% avec les opteron. Cet effet du ncgroup est donc bien caractéristique de la machine, et ne pose pas de gros problème d'optimisation sur des processeurs de dernière génération. Le ncgroup reste cependant un paramètre à contrôler et optimiser systématiquement, quelle que soit la machine ou le type de calcul.

On s'intéresse enfin à la mémoire vive utilisée par le calcul, avec le même cas test de la THI. La figure A.5 montre la place occupée en mémoire vive par AVBP en fonction du nombre de classe. On remarque

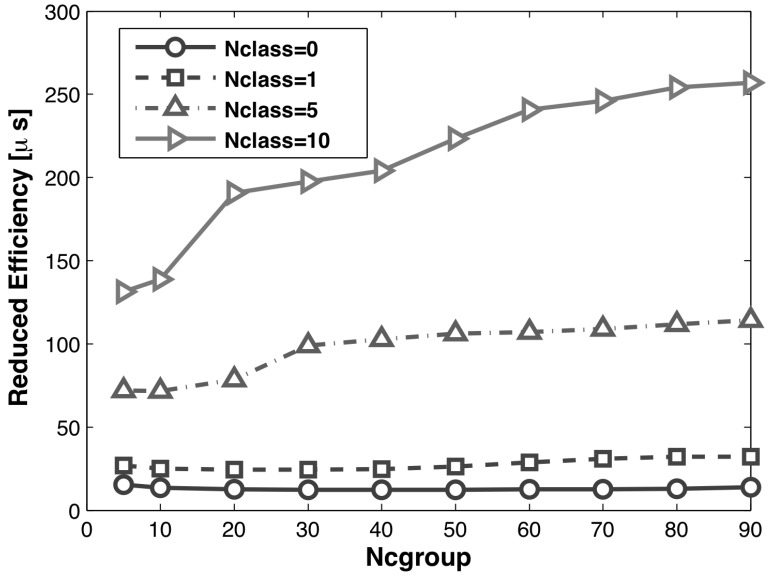


FIGURE A.2 – Efficacité réduite en fonction du ncgroup pour 0 (cercles), 1 (carrés), 5 (triangles vers le haut) et 10 classes (triangles vers la droite), obtenue sur 16 processeurs AMD Opteron Barcelona 8356 à 2.3 ghz.

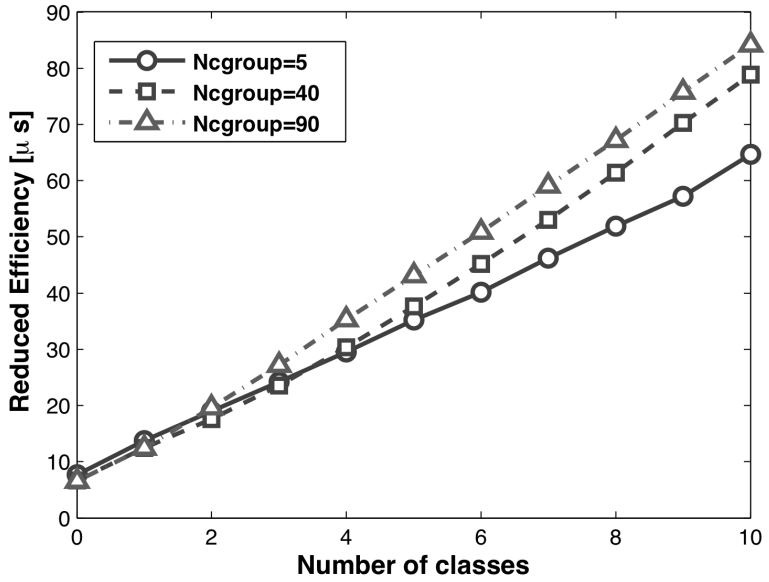


FIGURE A.3 – Efficacité réduite en fonction du nombre de classes pour un ncgroup de 5 (cercles), 40 (carrés) et 90 (triangles), obtenue sur 4 processeurs Intel Xeon W3520 cadencés à 2.66ghz.

que l'évolution est bien linéaire, confirmant une bonne implémentation de l'architecture multiclasse.

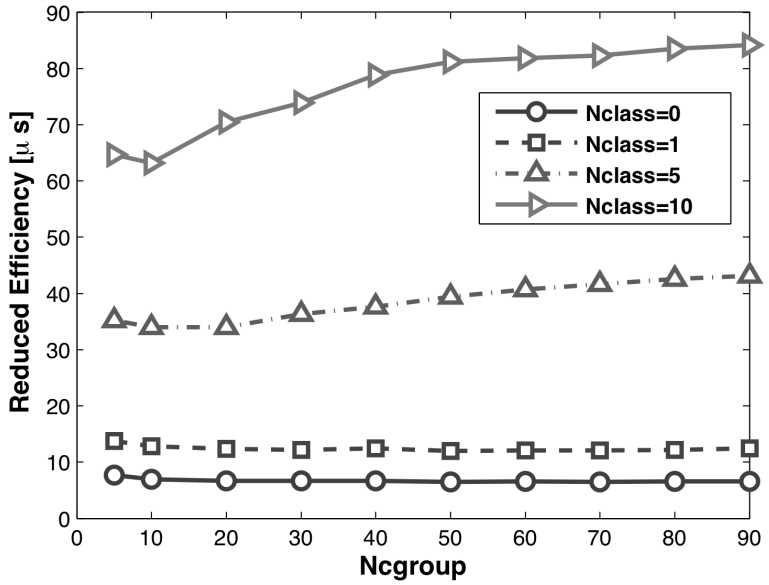


FIGURE A.4 – Efficacité réduite en fonction du ncgroup pour 0 (cercles), 1 (carrés), 5 (triangles vers le haut) et 10 classes (triangles vers la droite), obtenue sur 4 processeurs Intel Xeon W3520 cadencés à 2.66ghz.

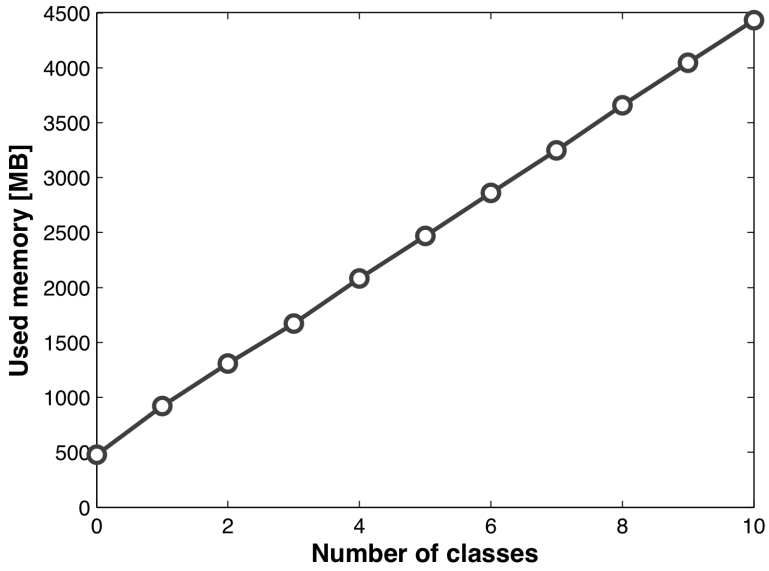


FIGURE A.5 – Mémoire vive utilisée par AVBP en fonction du nombre de classes.

Annexe B

Modèles de trainée et d'évaporation

B.1 Forces extérieures

La trajectographie des particules est la conséquence de nombreuses forces, dues à l'interaction entre le fluide porteur et les particules immergées. Ces forces sont résumées dans Maxey and Riley [1983]. Pour les écoulements qui nous intéressent, où le rapport entre la masse volumique des gouttes et du fluide porteur est très grand, Hinze [2005] et Desjonqueres et al. [1986] ont montré que les uniques forces à prendre en compte sont la trainée et la gravité. Nous négligerons ici la gravité, et nous ne modéliserons que les efforts de trainée.

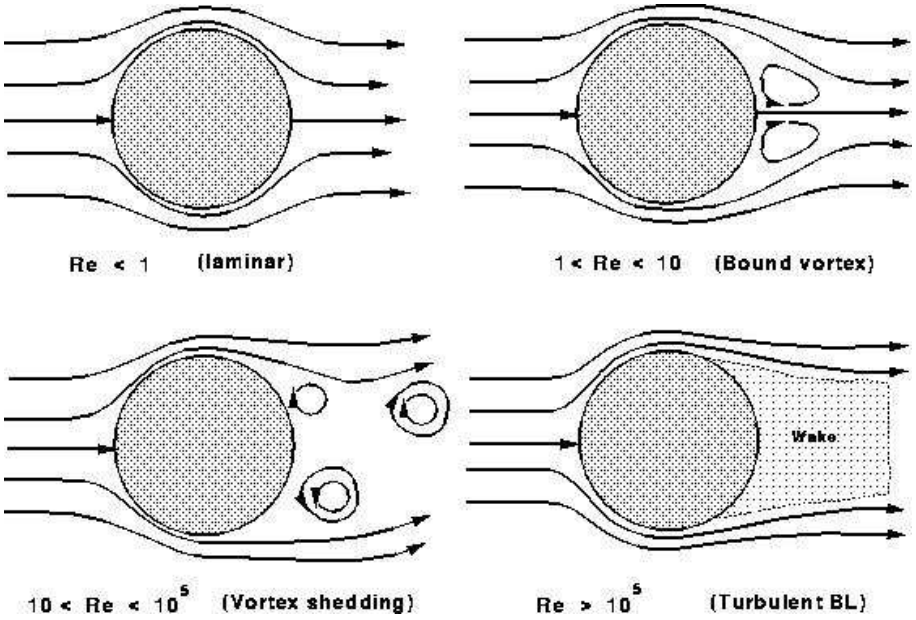


FIGURE B.1 – Ecoulement autour d'une sphère en fonction du nombre de Stokes.

La force de traînée s'exprime dans sa forme générale par :

$$F_{D,i} = \frac{1}{2} C_D \rho_g S_i |V_r| (U_{g,i} - c_{p,i}) \tag{B.1}$$

où $|V_r| = \sqrt{(U_{g,i} - c_{p,i})^2}$ est la norme de la vitesse relative entre le gaz et la goutte, S_i est la surface de la goutte projetée sur le plan perpendiculaire à l'axe i, appelée aussi surface efficace, et $U_{g,i}$ est la vitesse du gaz.

Pour des gouttes sphériques de diamètre d et de masse m_p, la force de traînée s'écrit :

$$F_{D,i} = \frac{1}{2} C_D \rho_g \frac{\pi d^2}{4} |V_r| (U_{g,i} - c_{p,i}) \tag{B.2}$$

d'où

$$\frac{F_{D,i}}{m_p} = \frac{6 F_{D,i}}{\rho_l \pi d^3} = \frac{3}{4} \frac{\rho_g}{\rho_l} C_D |V_r| \frac{(U_{g,i} - c_{p,i})}{d} \tag{B.3}$$

Le temps de relaxation de la particule, ou temps caractéristique de Stokes τ_p est défini par la formule :

$$\tau_p = \frac{4}{3} \frac{\rho_l}{\rho_g} \frac{d}{C_D |V_r|} \tag{B.4}$$

Le type d'écoulement autour de la goutte évolue en fonction du nombre de Reynolds (fig. B.1). Pour prendre en compte cet effet, le coefficient de traînée C_D pour une goutte isolée est donné par la corrélation empirique de Schiller and Nauman [1935] dans le cas turbulent :

$$C_D = \frac{24}{Re_d} \left(1 + 0.15 Re_d^{0.687}\right) \tag{B.5}$$

avec Re_d le nombre de Reynolds particulaire :

$$Re_d = \frac{\rho_g d |V_r|}{\mu_g} \tag{B.6}$$

où μ_g est la viscosité dynamique du gaz. Cette corrélation a été validée comparativement aux résultats expérimentaux de Roos and Wilmarth [1971]. Le temps de relaxation devient donc :

$$\tau_p = \frac{\rho_l d^2}{18 \mu_g} \left(1 + 0.15 {Re_d}^{0.687}\right)^{-1} \tag{B.7}$$

.

et on peut écrire :

$$F_{D,i} = \frac{m_p}{\tau_p} (U_{g,i} - c_{p,i}) \tag{B.8}$$

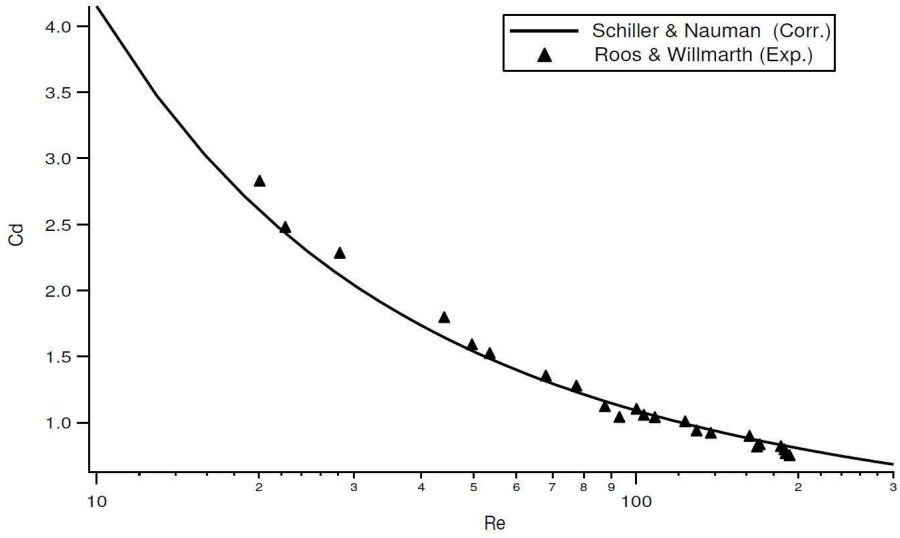


FIGURE B.2 – Corrélation empirique du coefficient de trainée de Schiller and Nauman [1935], en comparaison aux résultats expérimentaux de Roos and Wilmarth [1971].

Le temps de relaxation τ_p est un paramètre capital concernant le comportement de la phase dispersée dans un écoulement turbulent. Dans un tel écoulement, on peut caractériser le comportement des particules par le nombre de Stokes, qui est le rapport entre le temps de relaxation des particules et une échelle de temps du champ turbulent :

$$St_K = \frac{\tau_p}{\tau_K} \tag{B.9}$$

$$St_L = \frac{\tau_p}{\tau_l} \tag{B.10}$$

$$St_\varepsilon = \frac{\tau_p}{\tau_\varepsilon} \tag{B.11}$$

St_K est le nombre de Stokes relatif au temps de Kolmogorov, St_L est le nombre de Stokes relatif au temps Lagrangien et St_ε est le nombre de Stokes relatif au temps de l'échelle de coupure. Si le nombre de Stokes est «1, la particule pourra être capturée par l'échelle du gaz considérée, si le Stokes est »1, la particule ne sera pas influencé par le gaz. Pour les Stokes intermédiaires, la particule sera seulement dévié par le gaz. Ces échelles ont une grande importance quand on s'interesse au two-way coupling entre le liquide et le gaz. En effet, d'après Fig. B.3 (Elgobashi and Truesdell [1993]), pour une certaine fraction volumique de liquide, on doit prendre en compte l'effet du gaz sur le liquide, mais aussi celui du liquide sur le gaz. Des considérations sur la modélisation seront abordées dans le chapitre 2.4.

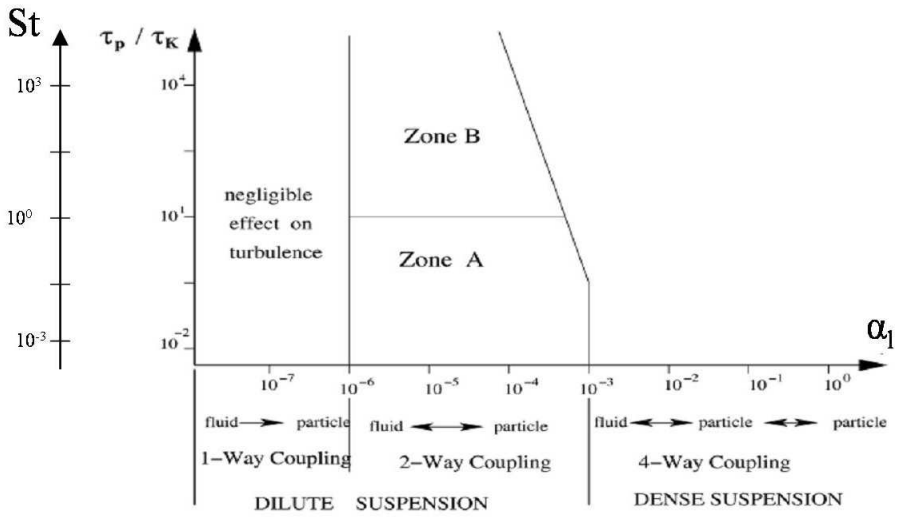


FIGURE B.3 – Niveau de couplage entre la phase dispersée et la phase gazeuse en fonction de la fraction volumique de liquide selon Elgobashi and Truesdell [1993].

B.2 Évaporation

L'évaporation des gouttes est capitale dans les applications énergétiques, et de nombreux modèles existent, avec chacun leur degré de précision. Une revue des modèles existants est disponible dans Sazhin [2006]. On détaille le modèle utilisé ici. Le modèle d'évaporation utilisé est un modèle hydrodynamique, écrit sous l'hypothèse de goutte isolée dans un milieu gazeux sans combustion et de température de la goutte uniforme Spalding [1953], Abramzon and Sirignano [1989] (hypothèse d'une conductivité thermique infinie). L'interface liquide/gaz est supposée en état d'équilibre thermodynamique, ce qui permet d'utiliser la relation de Clausius-Clapeyron :

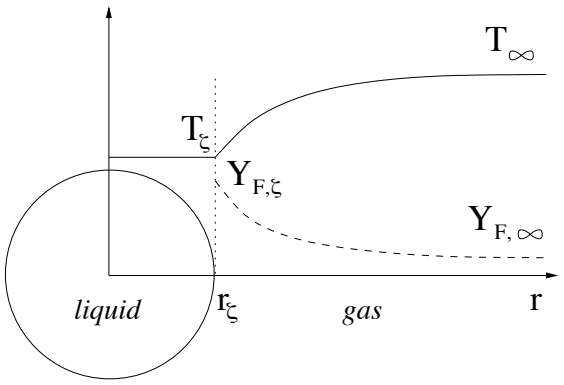


FIGURE B.4 – Goutte isolée à la température T_ζ s'évaporant dans un écoulement de gaz à la température T_∞ et avec une fraction massique de carburant $Y_{F,\infty}$.

La température de la goutte est calculée par l'équation de l'enthalpie de la phase liquide qui prend bien en compte les phases de réchauffement et d'évaporation.

Transfert massique

Le taux de transfert de masse $\dot{m}_p$ dépend seulement des variables à $r = r_\zeta$ et $r \to \infty$ Kuo [2005] :

$$\dot{m}_p = -\pi d\, Sh\, [\rho D_F] \ln(1 + B_M) \tag{B.12}$$

Sh est le nombre de Sherwood donné par :

$$Sh = 2 + K Re_p^{1/2} {Sc_F}^{1/3} \tag{B.13}$$

où le terme $K Re_p^{1/2} {Sc_F}^{1/3}$ prend en compte les effets convectifs liés à la vitesse relative entre les phases. Dans la littérature, K varie entre 0.552 et 0.6 Ranz and Marshall [1952]. Dans AVBP la valeur $K = 0.55$ a été retenue.
Le produit $[\rho D_F]$ est obtenu à partir du nombre de Schmidt du carburant Sc_F :

$$[\rho D_F] = \frac{\mu}{Sc_F} \tag{B.14}$$

B_M est le nombre de Spalding de masse lié à la différence de fraction massique de carburant (indice F) entre l'interface et l'infini :

$$cpEB_M = \frac{Y_{F,\zeta} - Y_{F,\infty}}{1 - Y_{F,\zeta}} \tag{B.15}$$

où $Y_{F,\zeta}$ peut être écrit en fonction de la fraction molaire $X_{F,\zeta}$:

$$Y_{F,\zeta} = \frac{X_{F,\zeta} W_F}{X_{F,\zeta} W_F + (1 - X_{F,\zeta})\, \overline{W}_{nF,\zeta}} \tag{B.16}$$

où $\overline{W}_{nF,\zeta}$ est la masse molaire moyenne du *pseudo*-mélange constitué de toutes les espèces sauf le carburant. En faisant l'hypothèse que la composition de ce mélange n'évolue pas entre ζ et ∞, on obtient :

$$\overline{W}_{nF,\zeta} = \overline{W}_{nF,\infty} = \frac{1 - Y_{F,\infty}}{1 - Y_{F,\infty} \frac{W}{W_F}} W \tag{B.17}$$

où $X_{F,\zeta}$ est donnée par la loi de Raoult pour un mélange idéal de gaz parfaits :

$$X_{F,\zeta} = \frac{P_{F,\zeta}}{P} \tag{B.18}$$

où $P_{F,\zeta}$ est la pression partielle de carburant gazeux à l'interface donnée par la relation de Clausius-Clapeyron :

$$P_{F,\zeta} = P_{cc}\, exp\left(\frac{W_F L_v}{\mathcal{R}} \left(\frac{1}{T_{cc}} - \frac{1}{T_\zeta}\right)\right) \tag{B.19}$$

P_{cc} et T_{cc} sont respectivement la pression et la température de référence correspondant à un point sur la courbe de saturation du carburant. L_v est la chaleur latente massique d'évaporation représentant la différence d'enthalpie entre les phases à la température de référence T_{ref} :

$$L_v = \Delta h_{s,F}\left(T_{ref}\right) = h_{s,F}\left(T_{ref}\right) - h_{s,p}\left(T_{ref}\right) \tag{B.20}$$

Dans Eq. B.19, la température de l'interface T_ζ a été supposée égale à la température de la goutte : $T_\zeta = T_p$. Dans Eq. B.15 et B.17, la condition à l'infini correspond à l'état thermodynamique du gaz non perturbé par la goutte. Pour des écoulements dilués, la distance entre les gouttes est suffisament grande pour garantir que les gouttes n'interagissent pas entre elles. En conséquence l'état infini (∞) correspond aux valeurs moyennes locales Eulériennes du gaz dans la cellule.

Échange de chaleur

Le flux conductif de gaz à l'interface est approché par l'expression obtenue pour une particule sans changement de phase :

$$\phi_g^c = -\phi_l^c = \pi d Nu \lambda \left(T_\zeta - T_\infty\right) \frac{ln(1+B_T)}{B_T} \tag{B.21}$$

où

$$B_T = \frac{\overline{C_p}\left(T_\zeta - T_\infty\right)}{\Delta h_{s,F}\left(T_\zeta\right) + \phi_l^c/\dot{m}_p} \tag{B.22}$$

est le nombre de Spalding de température et est évalué par $B_T = max\{\varepsilon, (1+B_M)^{Sh/(NuLe_F)} - 1\}$, où ε est un petit nombre utilisé pour éviter les erreurs numériques quand B_T tend vers 0 dans Eq. B.21. ϕ_l^c est le flux conductif entrant dans la goutte. Nu est le nombre de Nusselt exprimé de manière similaire au nombre de Sherwood (Eq. B.13) :

$$Nu = 2 + 0.55 Re_p^{1/2} Pr^{1/3} \tag{B.23}$$

La conductivité thermique du gaz λ est obtenue à partir du nombre de Prandtl Pr :

$$\lambda = \frac{\mu \overline{C_p}}{Pr} \tag{B.24}$$

Coefficient de transport : la règle des 2/3

Dans Eq. B.12 et B.21, les propriétes de transport $[\rho D_F]$ et λ sont supposées constantes dans l'intégration des équations de conservation. En réalité, ces propriétées varient à cause des variations de composition et de température entre r_ζ et l'infini. Cette variation peut être prise en compte si les valeurs de référence sont judicieusement choisies :

$$T_{ref} = (1-a)\,T_\zeta + a T_\infty \tag{B.25}$$

$$Y_{k,ref} = (1-a)\,Y_{k,\zeta} + a Y_{k,\infty} \tag{B.26}$$

où $a = 1/3$ Hubbard et al. [1975], Versaevel [1996].

Traitement numérique de l'ébullition

Le nombre de Spalding de masse (Eq. B.15) présente une singularité quand $Y_{F,\zeta} = 1$. Cette valeur est atteinte quand la température à l'interface atteint la température d'ébullition à la pression considérée $T_b(P)$ donnée par la relation de Clausius-Clapeyron (Eq. B.19) :

$$T_b = \left(\frac{1}{T_{cc}} - \frac{\mathcal{R}}{W_F L_v} \ln\left(\frac{P}{P_{cc}} \right) \right)^{-1} \tag{B.27}$$

Analytiquement la loi d'évaporation (Eq. B.12) ne permet pas d'atteindre la température d'ébullition puisque le flux de chaleur pour le liquide devient nul juste avant. Numériquement, le manque de résolution spatiale ou temporelle peut conduire à des températures supérieures à T_b. Dans ce cas, la température de liquide est fixée à la température d'ébullition et le flux conductif de liquide est fixé à zéro. Le taux d'évaporation est alors :

$$\dot{m}_p \left(T_\zeta = T_b \right) = \frac{\phi_g^c}{\Delta h_{s,F} \left(T_b \right)} \tag{B.28}$$

Valeur de référence pour l'enthalpie liquide

L'enthalpie liquide $h_{s,p}\left(T_\zeta\right)$ est définie à partir d'une valeur de référence différente de celle utilisée pour l'enthalpie du gaz $h_{s,F}\left(T_\zeta\right)$. Il faut donc ajouter un terme additionnel dans l'expression du flux d'enthalpie de la phase liquide : $+\dot{m}_p h_{s,corr}$ avec $h_{s,corr} = h_{s,F}\left(T_{l,ref}\right) - L_v$.

Annexe C

Publications

-A.Vié, L. Martinez, S. Jay, A. Benkenida and B. Cuenot, ***Validation of the eulerian mesoscopic approach in particle-charged homogeneous isotropic decaying turbulence in the scope of large eddy simulation of fuel sprays***, 11^{th} International Conference on Liquid Atomization and Sprays Systems, Vail, USA, 2009

-A.Vié, M. Sanjosé, S. Jay, B. Cuenot, C. Angelberger and M. Massot, ***Evaluation of a multifluid mesoscopic eulerian formalism on the large eddy simulation of an aeronautical-type configuration***, 7^{th} International Conference on Multiphase Flow, Tampa, USA, 2010

ICLASS 2009, 11th Triennial International Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Vail, Colorado USA, July 2009

Validation of the Eulerian Mesoscopic Approach in Particle-Charged Homogeneous Isotropic Decaying Turbulence in the scope of Large Eddy Simulation of Fuel Sprays

A. Vié[*,1], L. Martinez[1], S. Jay[1], A. Benkenida[1] and B. Cuenot[2]
[1]IFP, 1&4 av. de Bois-Préau, 92852 Rueil-Malmaison Cedex - FRANCE
[2]CERFACS, 42 av. G. Coriolis, 31057 Toulouse Cedex 1 - FRANCE

Abstract

This work is devoted to the simulation of Diesel like sprays using an Eulerian-Eulerian approach. For this purpose, the AVBP code is used to perform the computations. It solves the compressible Navier Stokes equations for reactive two phase flows with low dissipation schemes adapted to Large Eddy Simulation (LES). To simulate the liquid phase, the Mesoscopic Eulerian Formalism (MEF) developed by Fevrier et al. is used. In this approach, an analogy is made between particles of a dispersed liquid phase, and molecules in a gas. Starting from the Boltzmann equation, it allows to determine eulerian conservation equations. This formalism was first designed for dilute sprays. In order to simulate fuel sprays in engines, these models have been adapted to dense sprays by the addition of collision effects.

The formalism is validated by Direct Numerical Simulation (DNS) of homogeneous isotropic decaying turbulence, loaded with inertial particles. The carrier phase is initiated with a Passot-Pouquet spectrum. The particles are injected uniformly at the same velocity as the carrier phase.

For non-collisional simulations, results are compared to Eulerian/Lagrangian Discrete Particles Simulation (DPS), considered as a reference. Simulations are performed with one-way coupling drag force (no modification of the gas phase by the liquid phase). As the Stokes number is 1.2, strong preferential concentration effects are expected. Results show that the total energy decrease is well reproduced for both phases with the MEF approach, and that preferential concentration effects are in good agreement with DPS computations.

For collisional simulations, the results are analysed qualitatively. To allow a parametric study, the collision and relaxation time scales of the liquid phase are varied: the Stokes number is varied between 0.6 and 2.4 and the mean liquid volume fraction between 0.027% and 2.7%. Results show that all expected asymptotic behaviours are well exhibited.

Introduction

To simulate fuel sprays, two approaches are commonly used: Lagrangian and Eulerian methods. Lagrangian methods consist in tracking and moving each particles or parcels (group of particles). But for industrial applications, the number of particles required to obtain correct statistics is high and demands multiprocessor computations with efficient load balancing to handle the inhomogeneous dispersed phase.
Eulerian methods are simpler to implement, as they allow to simulate realistic particle concentrations, with the same numerical and parallelization approaches for both gas and liquid phase. However this comes with an increased effort in modeling issues.
This paper is devoted to the validation of the MEF as implemented in AVBP [1] in the case of Homogeneous Isotropic Turbulence (HIT). This validation is done by comparison with DPS performed with the high order NTMIX code [2].

[*]Corresponding author, aymeric.vie@ifp.fr

Equations and models for the dispersed phase

A. Mesoscopic Eulerian Formalism

Eulerian liquid conservation equations are based on the MEF developed by Février et al.[3]. Inspired by the gas kinetic theory, it defines conservation equation, starting from the Boltzmann equation [4].

The key point of this formalism is the decomposition of particle velocities v_p into a correlated part V_p common for all particles, and an uncorrelated part $v'_{p,}$ proper to each particle. After statistical averaging of the particles variables over a large number of realizations, conditioned by one realization of the gas phase, equations for the liquid phase write:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_l\alpha_l + \frac{\partial}{\partial x_i}\rho_l\alpha_l U_{l,i} = 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_l\alpha_l U_{l,i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\rho_l\alpha_l U_{l,i}U_{l,j} = \frac{\rho_l\alpha_l}{\tau_p}\left(U_{g,i}-U_{l,i}\right) - \frac{\partial}{\partial x_j}\rho_l\alpha_l\delta R_{l,ij} - \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{2}{3}\rho_l\alpha_l\delta\theta_l\delta_{ij} + P_{coll}\delta_{ij}\right) + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\xi_{coll}\frac{\partial}{\partial x_k}U_{l,k}\right) \tag{2}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\rho_l\alpha_l\delta\theta_l + \frac{\partial}{\partial x_i}\rho_l\alpha_l\delta\theta_l U_{l,i} &= -2\frac{\rho_l\alpha_l}{\tau_p}\delta\theta_l - \rho_l\alpha_l\delta R_{l,ij}\frac{\partial}{\partial x_j}U_{l,i} - \frac{\partial}{\partial x_j}\rho_l\alpha_l\delta K_{l,iij} \\ &\quad -\left(\frac{2}{3}\rho_l\alpha_l\delta\theta_l + P_{coll}\right)\frac{\partial}{\partial x_j}U_{l,j} + \rho_l\alpha_l\frac{e^2-1}{3\tau_c}\delta\theta_l + \left(\xi_{coll}\frac{\partial}{\partial x_k}U_{l,k}\right)\frac{\partial}{\partial x_i}U_{l,i}\end{aligned} \tag{3}$$

where α_l is the liquid volume fraction, U_l the correlated velocity of the MEF, and $\delta\theta_l$ the Random Uncorrelated discrete particles Energy (RUE) related to the uncorrelated velocity v'_p by the relationship $\delta\theta_l = 1/2.\langle v'_p.v'_p\rangle$. The relaxation time scale is defined as $\tau_p=\rho_l d^2/(18\mu_g)$.

B. Closure Models (with and without collisions)

The equations for the liquid phase presented previously have five unclosed terms : $\delta R_{l,ij}$, $\delta K_{l,iij}$, P_{coll} *and* ξ_{coll}. The two first terms are modeled respectively by a viscous assumption and by a diffusion term similar to Fick's law [5]:

$$\delta R_{l,iij} = -\left(\nu_{kin}+\nu_{coll}\right)\left(\frac{\partial U_{l,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial U_{l,j}}{\partial x_i} - \frac{\partial U_{l,k}}{\partial x_k}\frac{\delta_{ij}}{3}\right) \tag{4}$$

$$\delta K_{l,iij} = -\left(\kappa_{kin}+\kappa_{coll}\right)\left(\frac{\partial\delta\theta_l}{\partial x_j}\right) \tag{5}$$

Without collision effects, P_{coll}, ξ_{coll}, ν_{coll} and κ_{coll} are zero, and ν_{kin} and κ_{kin} are written as:

$$\nu_{kin} = \frac{\tau_p}{3}\delta\theta_l, \quad \kappa_{kin} = \frac{10}{27}\tau_p\delta\theta_l \tag{6}$$

Taking into account collision changes the modeling of the kinetic viscosity and diffusion defined in Eq. 6. The principles and development of these models are reviewed in [6],[7]. The collision characteristic time scale is defined as:

$$\tau_c = \frac{d}{24 g_0\alpha_p}\sqrt{\frac{3\pi}{\delta\theta_l}}, \qquad \text{where} \qquad g_0 = \left(1-\frac{\alpha_l}{\alpha_m}\right)^{-2.5\alpha_m} \text{ and } \alpha_m = 0.64 \tag{7}$$

So that the modified kinetic viscosity and diffusivity write:

$$\nu_{kin,c} = \frac{\tau_p}{3}\delta\theta_l\left(1+\alpha_1 g_0\frac{2}{5}(1+e)(3e-1)\right)\Bigg/\left(1+\frac{\tau_p}{\tau_c}\frac{(1+e)(3-e)}{10}\right) \tag{8}$$

$$\kappa_{kin,c} = \frac{2}{3}\delta\theta_l\left(1+\alpha_1 g_0\frac{3}{5}(1+e)^2(2e-1)\right)\Bigg/\left(\frac{9}{5\tau_p}+\frac{(19-33e)(1+e)}{100\tau_c}\right) \tag{9}$$

where e is the elasticity coefficient. ν_{coll}, κ_{coll}, P_{coll} and ξ_{coll} are written as:

$$\nu_{coll} = \frac{4}{5}\alpha_1 g_0 (1+e)\left(\nu_{kin,c} + d\sqrt{\frac{2\delta\theta_l}{3\pi}}\right), \quad \kappa_{coll} = \alpha_1 g_0 (1+e)\left(\frac{6}{5}\kappa_{kin,c} + \frac{4}{3}d\sqrt{\frac{2\delta\theta_l}{3\pi}}\right) \tag{10}$$

$$P_{coll} = \frac{4}{3}\rho_l \alpha_l^2 g_0 (1+e)\delta\theta_l, \quad \xi_{coll} = \frac{4}{3}\rho_l \alpha_l^2 g_0 (1+e) d\sqrt{\frac{2\delta\theta_l}{3\pi}} \tag{11}$$

C. Gas phase equations

Equations for the gas phase are the classical Eulerian Navier-Stokes equations [1]:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_g + \frac{\partial}{\partial x_i}\rho_g U_{g,i} = 0 \tag{12}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_g U_{g,i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\rho_g U_{g,i} U_{g,j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(-P\delta_{ij} + \tau_{ij}\right) \tag{13}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_g E_g + \frac{\partial}{\partial x_i}\rho_g E_g U_{g,i} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(-P\delta_{ij} + \tau_{ij}\right)U_{g,i} \tag{14}$$

where τ_{ij} is the stress tensor of the gas phase. This set of equation does not take into account the reduction of the gas volume fraction induced by the presence of the liquid phase. Taking into account that the dense zone correspond to a very small region of a spray, this assumption has only a weak influence.

Main characteristics of the HIT test case

The test case is a periodic cubic box sized 2π mm, meshed with 64^3 equivolumes cells. To obtain an initial turbulent gas flow field, a Passot-Pouquet spectrum is used [8]. Particles are uniformly superposed, with the same local velocity as the gas. Fig. 1a shows a gas vorticity field in the median cutting plane. A highly inhomogeneous distribution is observed. The main issue of a gas/particles HIT is that this distribution affects the particles behavior, creating preferential particle concentrations in low vorticity zones, as exhibited by Fig. 1a and Fig. 1b.

To characterize the liquid phase, the Stokes Number is introduced: $St = \tau_p/\tau_L$ where τ_L is the integral Lagrangian time scale of the gas turbulence [9]. As the same gas flow field is used for all cases (turbulence properties are listed in Table 2), the Stokes number only varies with τ_p. Three different values of τ_p were tested, for different liquid loads. Table 3 summarizes the different test cases.

Results and Discussion

All results are presented in non-dimensional variables, denoted by the superscript $^+$. The corresponding reference values are listed in Table 1.

A. Gas HIT

To check the accuracy of AVBP, using a 3rd order scheme, for HIT simulation, the decay of gaseous kinetic energy is compared to the results obtained with NTMIX, and its a 6th order scheme. The results shown in Fig. 2 are in very good agreement, confirming the validity of the AVBP simulation.

B. Gas/particule HIT

Results are analyzed in terms of preferential particle concentration and energy, compared to DPS realized by Kaufmann et al. [10]. As Elghobashi et al. shows in [11], DPS can capture essential features of particles dynamic and may be considered as a reference solution here. Simulations are run in one-way drag coupling. $< . >$ is the averaging operator over the whole domain. The preferential particle concentration is evaluated by a distribution function [12]:

$$g_{pp}^{\Delta x} = < n_p^2(\vec{x}) > / < n_p(\vec{x}) >^2 \tag{15}$$

A first test case is carried out to verify the MEF. The Stokes number is set to 1.2. Fig. 3 compares the different energy terms for both approaches (MEF and DPS) and the agreement is very good. For a better view, the uncorrelated

energy is plotted again in Fig. 4, showing a very accurate prediction of the MEF. This demonstrates the excellent behavior of the closure models for RUE terms, defined previously. Figure 5 shows the preferential particle concentration and again the good performance of MEF, compared to DPS.
Considering collisional simulations, results are analyzed qualitatively only. Figures 6 and Fig. 7 show the results for MEF simulations without collisions, then with collisions for two different loads. Preferential particle concentration and RUE both show that the model degenerates to the non-collisionnal case when the liquid volume fraction goes to 0. Furthermore, collisions increase the preferential particle concentration effect and decrease RUE. As explained by Fede et al. [13], the first effect is due to the diminution of the mean free path of the particles, acting as a the diminution of the liquid phase viscosity [14]. Concerning RUE, considering that the total energy of the particles is not affected by collisions, the effect may be only due to a modification of the energy exchange between correlated and uncorrelated motions.
To qualify the influence of the Stokes number time, the relaxation time is modified trough the liquid density. Figures 8 and Fig. 9 preferential concentration and RUE for the three cases. For lower τ_p, collisions have no effect, even with high volume fractions. When increasing τ_p, collisions effects on preferential particle concentration and RUE become more and more sensible and predominant.

Conclusions

An extension to dense sprays of the Mesoscopic Eulerian Formalism (MEF) is presented and validated. First it is shown how the MEF compares with DPS approach in the particular test case of HIT with a diluted dispersed phase.
Very good agreement is obtained in terms of energy and preferential particles concentration. In particular, the fact that total energy evolution is perfectly reproduced is very important, and demonstrates that the formalism represents the one-way drag coupling very well, without loss of energy.
This allows to add collisions and run MEF simulations to study the effects on the dispersed phase. Expected asymptotic behaviors are well exhibited, with degeneracy to non-colliding results for small liquid volume fractions.
The next step is to compare MEF results to DPS results with collisions and two-way coupling, and to investigate the importance of polydispersion (in terms of droplet diameter and velocity) in the same configuration.

Acknowledgment

Numerical computations of the Eulerian simulations were performed on the supercomputer of IFP. The authors wish to thank Dr E. Riber and Dr P. Fede for many fruitful discussions.

Nomenclature

e inelasticity coefficient
E total enthalpy
g_{pp} distribution function
n_p number of particles
U velocity
α_l liquid volume fraction
$\delta\theta_l$ random uncorrelated energy
κ diffusivity
ν viscosity
τ_c collision rate
τ_L integral time scale
τ_p relaxation time scale

Subscripts
g gas
l liquid
kin kinetic
coll collisional

Superscripts
+ adimensioned variable

References

1. Moureau, V., Lartigue, G., Sommerer, Y., Angelberger, C., Colin, O., and Poinsot, T., *Journal of Computational Physics* 202: 710-736 (2005).
2. Vermorel, O., Bédat,B., Simonin, O., and Poinsot, T., *Journal of Turbulence* 335: 75-109 (2003).
3. Février, P., Simonin, O., and Squires, K., *Journal of Fluid Mechanics* 533: 1-46 (2005).
4. Chapman, S., and Cowling, T., *The mathematical theory of non-uniform gazes*, Cambridge University Press, 1939.
5. Kaufmann, A. Simonin, O., and Poinsot, T., *5th International Conference on Multiphase Flow*, Yokohama, Japan, 2005.
6. Peirano, E., and Leckner, B., *Progress in Energy and Combustion Science* 24: 259-296 (1996).
7. Boelle, A., Blazer, G., and Simonin, O., *Sixth ASME Gas-Solid Flows Symposium*, Hilton Head Island, US, 1995.
8. Passot, T., and Pouquet, A., *Journal of Fluid Mechanics* 181: 441-466 (1987).
9. Hogan, R.C., Cuzzi, J.N., *Physics of Fluids* 13: 2938-2945 (2001).

10. Kaufmann, A., Moreau, M., Simonin, O., and Hélie, J., *Journal of Computational Physics* 227: 6448-6472 (2008).
11. Elghobashi, S. and Truesdell, G., *Journal of Fluid Mechanics* 242: 655-700 (1992).
12. Simonin, O., Zaichik, L.I., Alipchenkov, V.M., and Février, P., *Physics of Fluids* 18: 125107 (2006).
13. Fede, P., and Simonin, O., *Physics of Fluids* 18: 045103 (2006).
14. Martinez, L., Benkenida, A., and Cuenot, B., *21th ILASS – Europe Meeting*, Muğla, Turkey, 2007.

Table 1. References variables.

L_{ref} (m)	t_{ref} (s)	U_{ref} ($m.s^{-1}$)	μ_{ref} ($kg.m^{-1}.s^{-1}$)
10^{-3}	$2.8818\ 10^{-6}$	347.0	$2.02\ 10^{-3}$

Table 2. Gas phase properties.

$u_f'^+$	ε^+	Re_t	l_t^+	η^+	τ_L^+	τ_η^+
0.0781	0.001	12.95	0.81	0.10	4.30	2.16

Table 3. Liquid phase properties for collisional and non-collisional cases.

α_l	St	τ_p^+	ρ_l ($kg.m^{-3}$)	d_l (μm)
0.00027	1.2	5.47	1916	17.3
0.027	1.2	5.47	1916	17.3
0.027	0.6	2.73	958	17.3
0.027	2.4	10.94	3832	17.3

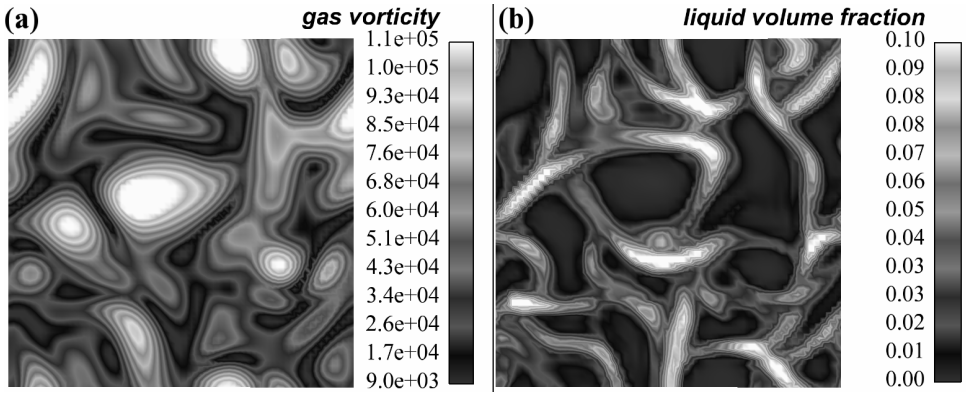


Figure 1. HIT (median cutting plane): (a) gas vorticity; (b) liquid volume fraction.

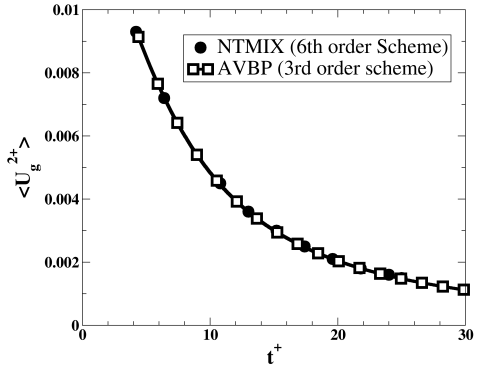


Figure 2. Gaseous kinetic energy time evolution: AVBP simulation (squares), NTMIX simulation.

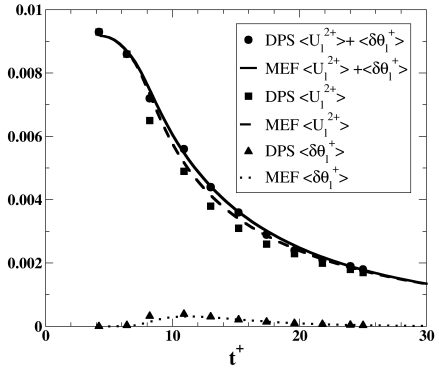


Figure 3. Liquid mean energies time evolution: total energy from DPS (circles) and MEF (solid line); correlated energy from DPS (squares) and MEF (dashed line); RUE from DPS (triangle up) and MEF (dotted line).

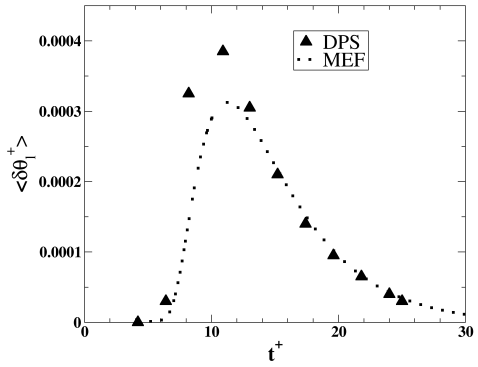


Figure 4. Mean RUE time evolution: MEF simulation (dots), DPS simulation (triangles).

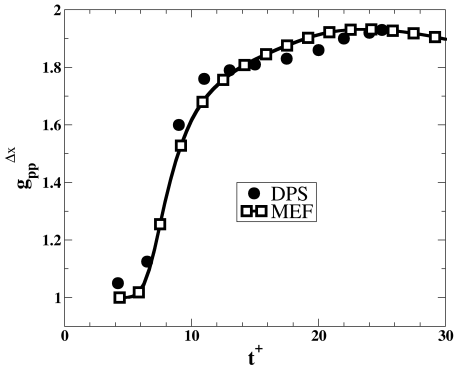


Figure 5. Preferential particle concentration time evolution: MEF simulation (squares), DPS simulation (circles).

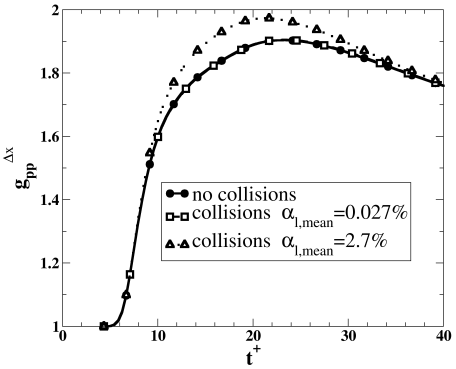


Figure 6. Preferential particle concentration time evolution of MEF simulations: without collisions (circle), with collisions at $\alpha_{l,mean}=0.027\%$ (square), with collisions at $\alpha_{l,mean}=2.7\%$ (triangle up).

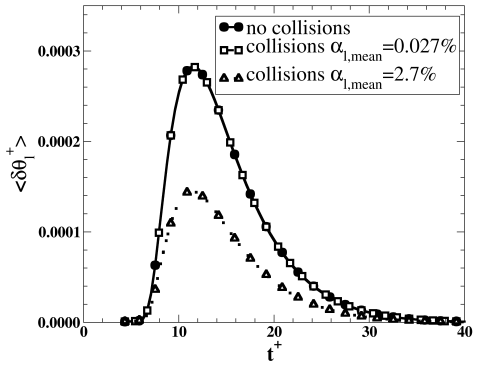


Figure 7. Mean RUE time evolution of MEF simulations: without collisions (circle), with collisions at $\alpha_{l,mean}=0.027\%$ (square), with collisions at $\alpha_{l,mean}=2.7\%$ (triangle up).

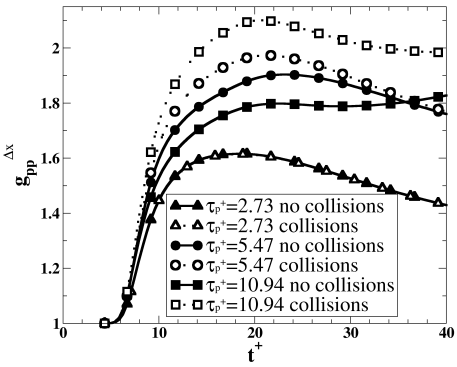


Figure 8. Preferential particle concentration time evolution of MEF simulations: with (full symbols) and without collisions (empty symbols); $\tau_p^+=2.73$ (triangles up), $\tau_p^+=5.47$ (circles) and $\tau_p^+=10.94$ (squares).

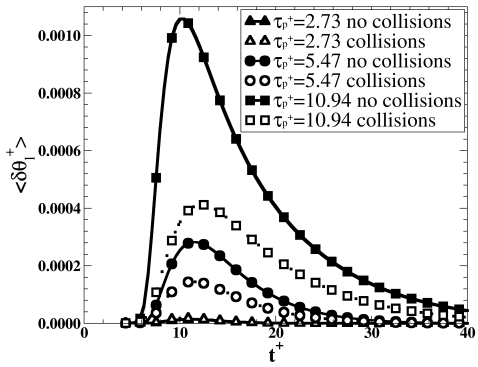


Figure 9. Mean RUE time evolution of MEF simulations: with (full symbols) and without collisions (empty symbols); $\tau_p^+=2.73$ (triangles up), $\tau_p^+=5.47$ (circles) and $\tau_p^+=10.94$ (squares).

7th International Conference on Multiphase Flow,
ICMF 2010, Tampa, FL, May 30 – June 4, 2010

Evaluation of a Multifluid Mesoscopic Eulerian Formalism on the Large Eddy Simulation of an aeronautical-type configuration

A. Vié*, M. Sanjosé†, S. Jay*, C. Angelberger*, B. Cuenot† and M. Massot‡

* IFP, 1&4 av. de Bois Préau, 92852 Rueil-Malmaison Cedex, FRANCE

† CERFACS, 42 av. G. Coriolis, 31057 Toulouse Cedex 1, FRANCE

‡ EM2C, CNRS UPR288, École Centrale de Paris, 92295 Châtenay-Malabry, FRANCE

aymeric.vie@ifp.fr

Keywords: Large Eddy Simulation, Two-phase flow, Eulerian Mesoscopic, Multifluid, aeronautical swirl injector

Abstract

This work describes the evaluation of a fully eulerian method to simulate polydisperse turbulent two phase flows: the Multifluid Mesoscopic Eulerian Formalism (MMEF). This approach is derived from the coupling between the Mesoscopic Eulerian Formalism (MEF) of Février et al. (2005), and the Multifluid Approach (MA) of Laurent and Massot (2001). The MA handles polydispersion by using a discretization of the droplet size space, whereas the MEF describes the velocity dispersion of monodisperse turbulent particle flows. The coupling of the two methods is expected to capture both behaviors. A first step toward this kind of approach was initially studied in Massot (2007), and the differences with the present work lie in the closure and modelling assumptions.
MMEF is integrated into the AVBP code from CERFACS/IFP, which solves the compressible Navier-Stokes equations for reactive flows with low dissipation schemes adapted to Large Eddy Simulation. These schemes encounter some difficulty for the Eulerian description of the liquid dispersed spray, highly compressible and showing stiff gradients and vacuum areas of droplet density. Specific numerical procedures are used to stabilize locally the solution, with limited effect on the accuracy.
The model is applied to the MERCATO aeronautical-type configuration. An analysis of characteristic time scales allows to evaluate the importance of polydispersion in this test rig. A preliminary test case consists in the evaporation of a chosen distribution in one computational cell. Physical conditions are the same as in MERCATO. Results are compared to the evaporation strategy used with MEF, and show the necessity to account for polydispersion description in order to capture size-velocity correlations.
A second test case is a two-dimensional vortex entraining droplets, in which droplets are injected uniformly. Due to the polydispersion of the liquid and its resulting centrifugal force, a spatial distribution of droplet mean diameter is observed, and confirms again the necessity of polydispersion.
Finally, the MMEF is applied to the MERCATO test rig, for which both experimental and numerical data are available. Comparisons of velocity profiles at selected downstream positions show a good agreement with measurements of MEF and MMEF in the central zone, whereas only the MMEF is able to capture the external zone. Comparisons of Droplet Number Density function at selected volumes inside the chamber also show a good agreement between MMEF and experiments.

Nomenclature

Roman symbols

c_p	droplet velocity ($\mathrm{m.s^{-1}}$)
f_p	Number Density Function
N	number of sections
S	droplet surface ($\mathrm{m^2}$)
D	deformation tensor ($\mathrm{s^{-1}}$)
T	droplet temperature (K)
u	phase velocity

Greek symbols

μ	kinetic viscosity ($\mathrm{m^2.s^{-1}}$)
ρ	density ($\mathrm{kg.m^{-3}}$)
τ_p	relaxation time (s)
Θ_l	Random Uncorrelated Energy ($\mathrm{m^2.s^{-2}}$)

Subscripts

g	gas
l	liquid
p	particle

Superscripts

(p)	section p

Others

δc_p	uncorrelated droplet velocity ($\mathrm{m.s^{-1}}$)
$\delta \mathbf{R_l}$	2nd order velocity correlations tensor ($\mathrm{m^2.s^{-2}}$)
$\delta \mathbf{S_l}$	3rd order velocity correlations tensor ($\mathrm{m^3.s^{-3}}$)
$\widehat{.}$	Favre averaged quantity
$\bar{.}$	Reynolds averaged quantity

Introduction

Large Eddy Simulation (LES) is a promising tool to improve the prediction of the mixture inside aeronautical combustion chambers. Indeed, its ability to solve a wide range of the turbulence spectrum, modelling only the smallest scales, allows to reproduce more accuratly interactions between the turbulence and the liquid fuel droplets.

This work aims at evaluating performance for liquid injection inside an aeronautical combustor. Lagrangian particle tracking methods are classically used but they suffer from numerical issues (parallelisation, statistical convergence, high number of particles) and special care must be taken for the liquid/gas coupling problems (interpolation of gas velocity, distribution of liquid/gas source terms)(Garcia (2009)). An alternative is eulerian methods, which use the same numerical methods for the gas and the liquid phases, and can be efficiently parallelized. So it seems well suited for complex industrial applications. However, it raises a number of modelling issues. In particular, the modelling of polydispersion is a difficult question. The Mesoscopic Eulerian Formalism (MEF)(Février et al. (2005)) is based on a locally monodisperse assumption, so it has no particle size distribution. To tackle this problem, the Multifluid Approach (MA) of Laurent and Massot (2001) has been coupled with the MEF. This formalism, called Multifluid Mesoscopic Eulerian Formalism (MMEF), is integrated in the AVBP code. After presenting the model equations and preliminary test cases, MMEF is applied to an aeronautical-type configuration. This application was simulated with lagrangian and eulerian methods (Sanjosé et al. (2008)), but never with a polydisperse eulerian formalism.

Model equations

The MEF is a statistical approach based on the droplet number density function (NDF) f_p:

$$f_p = f_p(\mathbf{x}, t, \mathbf{c_p}, S, T) \tag{1}$$

where t, $\mathbf{x}$, $\mathbf{c_p}$, S, T are respectively the time, droplet position, velocity, surface and temperature. The evolution of this NDF is driven by a Williams-Boltzmann equation (WBE) (Williams (1958)):

$$\frac{\partial f_p}{\partial t} + \frac{\partial c_{p,j} f_p}{\partial x_j} + \frac{\partial F_{d,j} f_p}{\partial c_{p,j}} + \frac{\partial R_S f_p}{\partial S} + \frac{\partial E_T f_p}{\partial T} = 0 \tag{2}$$

where $\mathbf{F}_d$, R_S and E_T correspond to drag force, mass and heat transfer. The drag force F_d is written as :

$$\mathbf{F}_d = \frac{\mathbf{c_p} - \mathbf{u_{g@l}}}{\tau_p} \tag{3}$$

where $\mathbf{u}_{g@l}$ is the gas velocity at droplet position, and $\tau_p = \rho_l S/18\pi\mu_g$ is the particle relaxation time. R_S and E_Θ are defined as:

$$R_S = \frac{dS}{dt} = \frac{4\sqrt{\pi}}{\rho_l S^{1/2}} \dot{m}_p \tag{4}$$

$$E_T = \frac{dT}{dt} = \frac{Q_p}{m_p C_{p,l}} \tag{5}$$

where $\dot{m}_p$ is the mass rate, and Q_p is the heating flux. Those source terms are modeled using a finite liquid conductivity with a gas spherical symmetry diffusion model (Kuo (2005), Sirignano (1999)).

Using $< \Phi >= 1/n_l \int_{\mathbb{R}} \Phi f_p dc_p dT$ as an averaging

operator, some characteristic quantities are defined:

$$\begin{aligned} n_l(x,t,S) &= \int_{\mathbb{R}} f_p dc_p dT \\ u_{l,i}(x,t,S) &= < c_{p,i} > \\ T_l(x,t,S) &= < T > \\ \delta c_{p,i}(x,t,S) &= c_{p,i} - u_{l,i} \\ \delta R_{l,ij}(x,t,S) &= < \delta c_{p,i} \delta c_{p,j} > \\ \delta\Theta_l(x,t,S) &= \delta R_{l,ii}(x,t,S)/2 \\ \delta S_{l,ijk}(x,t,S) &= < \delta c_{p,i} \delta c_{p,j} \delta c_{p,k} > \end{aligned}$$

where $u_{l,i}$ is the mesoscopic eulerian velocity field, shared by all particles of size S at position x and time t and δc_p is a residual velocity, proper to each particle. T_l, $\delta R_{l,ij}$, $\delta S_{l,ijk}$ and $\delta\Theta_l$ are respectively the liquid mean temperature, the second and third order velocity correlation tensors, and the Random Uncorrelated Energy (RUE), corresponding to the residual velocity.

Multiplying the WBE (Eq. 2) by any function Ψ, and integrating over particles velocities and temperatures, one can obtain the equation of Enskog:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t} n_l \langle\Psi\rangle + \frac{\partial}{\partial x_j} n_l u_{l,j} \langle\Psi\rangle + \frac{\partial}{\partial S} n_l \langle R_S \Psi\rangle = \\ &\quad + n_l \langle F_{d,j} \frac{\partial \Psi}{\partial c_{p,j}}\rangle + n_l \langle R_S \frac{\partial \Psi}{\partial S}\rangle + n_l \langle E_T \frac{\partial \Psi}{\partial T}\rangle \\ &\quad + n_l \langle \frac{\partial \Psi}{\partial t}\rangle + n_l \langle c_{p,j} \frac{\partial \Psi}{\partial x_j}\rangle + \frac{\partial}{\partial x_j} n_l \langle \delta c_{p,j} \Psi\rangle \end{aligned} \tag{6}$$

Replacing Ψ by target quantities, the semi-kinetic system (Laurent et al. (2004)) is obtained:

$$\frac{\partial}{\partial t} n_l + \frac{\partial}{\partial x_m} n_l u_{l,m} = -\frac{\partial}{\partial S} n_l R_S \tag{7}$$

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t} n_l u_{l,i} + \frac{\partial}{\partial x_m} n_l u_{l,i} u_{l,m} = -\frac{\partial}{\partial S} n_p u_{l,i} R_S \\ &\quad - \frac{n_l}{\tau_p} (u_{l,i} - u_{g,i}) - \frac{\partial}{\partial x_m} n_l \delta R_{l,im} \end{aligned} \tag{8}$$

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t} n_l \Theta_l + \frac{\partial}{\partial x_m} n_l \Theta_l u_{l,m} = -\frac{\partial}{\partial S} n_l \Theta_l R_S \\ &\quad - 2\frac{n_l}{\tau_p}\Theta_l - n_l \delta R_{l,ij} \frac{\partial}{\partial x_j} u_{l,i} - \frac{\partial}{\partial x_j} n_l \delta S_{l,iij} \end{aligned} \tag{9}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} n_l H_l + \frac{\partial}{\partial x_m} n_l H_l u_{l,m} = -\frac{\partial}{\partial S} n_l R_S H_l + n C_{p,l} E_T \tag{10}$$

where $H_l = C_p T_l$ is the liquid enthalpy. The approach described here is similar to the one used in Reveillon et al. (2002) and Massot (2004), as they start from a decomposition into mean and uncorrelated velocities, but differences appear when the uncorrelated terms are closed.

To obtain the multi-fluid system, the semi-kinetic system (Eq. 7-10) is integrated over particule size, assuming a discretization in N intervals $[S_p, S_{p+1}]$ called section from Greenberg et al. (1993): superscript (p) designates mass-weighted averaged quantities in interval p. Sectionnal quantities are then defined:

$$n_l(x,t,S) = m_l^{(p)}(x,t)\kappa_S^{(p)}(S) \tag{11}$$

$$m_l^{(p)}(x,t) = \int_{S_p}^{S_{p+1}} \rho_l \frac{S^{3/2}}{6\sqrt{\pi}} n_l dS \tag{12}$$

where $\kappa_S^{(p)}(S)$ is the shape of the distribution function over each section. Multiplying the kinetic system (Eq. 7-10) by $\rho_l \frac{S^{3/2}}{6\sqrt{\pi}}$ and integrating over sections gives:

$$\frac{\partial}{\partial t} m_l^{(p)} + \frac{\partial}{\partial x_m} m_l^{(p)} u_{l,m}^{(p)} = E^{(p)}(1) \tag{13}$$

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t} m_l^{(p)} u_{l,i}^{(p)} + \frac{\partial}{\partial x_m} m_l^{(p)} u_{l,i}^{(p)} u_{l,m}^{(p)} = E^{(p)}(u_{l,i}^{(p)}) \\ &\quad - \frac{m_l^{(p)}}{\tau_p^{(p)}} \left(u_{l,i}^{(p)} - u_{g,i}\right) - \frac{\partial}{\partial x_m} m_l^{(p)} \delta R_{l,im}^{(p)} \end{aligned} \tag{14}$$

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t} m_l^{(p)} \delta\Theta_l^{(p)} + \frac{\partial}{\partial x_m} m_l^{(p)} \delta\Theta_l^{(p)} u_{l,m}^{(p)} = E^{(p)}(\delta\Theta_l^{(p)}) \\ &\quad - 2\frac{m_l^{(p)}}{\tau_p^{(p)}} \delta\Theta_l^{(p)} + \Xi^{(p)} \end{aligned} \tag{15}$$

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t} m_l^{(p)} H_l^{(p)} + \frac{\partial}{\partial x_m} m_l^{(p)} H_l^{(p)} u_{l,m}^{(p)} = E^{(p)}(H_l^{(p)}) \\ &\quad + m_l^{(p)} C_{p,l} E_T^{(p)} \end{aligned} \tag{16}$$

where $E^{(p)}(\Phi)$ is the evaporation source term defined as:

$$\begin{aligned} E^{(p)}(\Phi^{(p)}) = &- \left(E_1^{(p)} + E_2^{(p)}\right) m_l^{(p)} \Phi^{(p)} \\ &+ E_1^{(p+1)} m_l^{(p+1)} \Phi^{(p+1)} \end{aligned} \tag{17}$$

and $\Xi^{(p)}$ is the uncorrelated flux of $\delta\Theta_l^{(p)}$ defined as:

$$\Xi^{(p)} = - m_l^{(p)} \delta R_{l,ij}^{(p)} \frac{\partial}{\partial x_j} u_{l,i}^{(p)} - \frac{\partial}{\partial x_m} m_l^{(p)} \delta S_{l,iim}^{(p)} \tag{18}$$

In Massot (2004), $\delta S_{l,iim}^{(p)}$ is neglected, whereas only the isotropic part of $\delta R_{l,ij}^{(p)}$ is considered in Eq. 14 and Eq. 18. For the isotropic test cases studied in Massot (2004), these assumptions have been verified by eulerian filtering of lagrangian computations. In the final application studied here, it is not possible to use these assumptions, due to the anisotropy of shear flows. So

the uncorrelated flux $\delta R_{l,ij}^{(p)}$ is decomposed into spherical and deviatoric parts:

$$\delta R_{l,ij}^{(p)} = P_{RUM}^{(p)}\delta_{ij} + \delta\Sigma_{l,ij}^{(p)} \tag{19}$$

where $P_{RUM}^{(p)} = 2/3\widehat{\delta\Theta}_l^{(p)}$ is the pressure due to Random Uncorrelated Motion. $\delta\Sigma_{l,ij}^{(p)}$ and $\delta S_{l,iim}^{(p)}$are closed using respectively a viscous assumption and a diffusion term similar to Fick's law (Kaufmann et al. (2008)):

$$\delta\Sigma_{l,ij}^{(p)} = -\nu_{RUM}^{(p)} D_{l,ij}^{(p)} \tag{20}$$

$$\delta S_{l,iim}^{(p)} = -\kappa_{RUM}^{(p)} \frac{\partial\delta\Theta_l^{(p)}}{\partial x_m} \tag{21}$$

where $D_{l,ij}^{(p)} = \left(\frac{\partial u_{l,i}^{(p)}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_{l,j}^{(p)}}{\partial x_i} - \frac{\partial u_{l,k}^{(p)}}{\partial x_k}\frac{\delta_{ij}}{3}\right)$, $\nu_{RUM}^{(p)} = \tau_p^{(p)}\delta\Theta_l^{(p)}/3$, and $\kappa_{RUM}^{(p)} = 2\Theta_l^{(p)}/3$. Those closures are derived from the assumption of a velocity distribution close to the maxwellian equilibrium one, which has been validated on Homogeneous Isotropic Turbulence for low Stokes Number (Vié et al. (2009)). But its validity for high Stokes numbers or shear flows is quite questionable, because the near-equilibrium assumption would not be verified. This issue is investigated in Masi (2010). It is shown that the anisotropy of the shear stress has to be accounted for.

As proposed in de Chaisemartin (2009) and advised in Laurent (2006), a distribution constant in radius is chosen. The function $\kappa_S^{(p)}(S)$ is then:

$$\kappa_S^{(p)}(S) = \frac{12}{\rho_l(S_{p+1}^2 - S_p^2)}\sqrt{\frac{\pi}{S}} \tag{22}$$

Evaporation terms are derived by an integration by part $\int_{S_p}^{S_{p+1}} \rho_l S^{3/2}/(6\sqrt{\pi}) R_S n_l dS$ (de Chaisemartin (2009)):

$$E_1^{(p)} = \rho_l \frac{S_p^{3/2}}{6\sqrt{\pi}} R_S^{(p)}\kappa_S^{(p)} = \frac{2S_p}{S_{p+1}^2 - S_p^2} R_S^{(p)} \tag{23}$$

$$E_2^{(p)} = \int_{S_p}^{S_{p+1}} \rho_l \frac{d_S(S^{3/2})}{6\sqrt{\pi}} R_S n_l dS = \frac{3}{S_p + S_{p+1}} R_S^{(p)} \tag{24}$$

where $E_1^{(p)}$ is the mass exchange between sections, and $E_2^{(p)}$ is the mass exchange with the gas phase.

Gas phase equations are the classical Navier-Stokes equations, with the coupling terms between liquid and gas phases due to drag and evaporation. As the liquid volume fraction is very low in the final application, the volume occupied by the liquid is neglected:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_g + \frac{\partial}{\partial x_m}\rho_g u_{g,m} = \sum_{p=1}^{N} E_2^{(p)} m_l^{(p)} \tag{25}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_g u_{g,i} + \frac{\partial}{\partial x_m}\rho_g u_{g,i}u_{g,m} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_m}\rho_g\nu_g D_{g,im} + \sum_{p=1}^{N}\left(\frac{m_l^{(p)}}{\tau_p^{(p)}}\left(u_{l,i}^{(p)} - u_{g,i}\right) + E_2^{(p)} m_l^{(p)} u_{l,i}^{(p)}\right) \tag{26}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_g E_g + \frac{\partial}{\partial x_m}(\rho_g E_g + P)u_{g,m} = + \frac{\partial}{\partial x_m}\rho_g\nu_g D_{g,im}u_{g,i} + \frac{\partial}{\partial x_m}Q_{g,ij} + \sum_{p=1}^{N}\begin{pmatrix} E_2^{(p)} m_l^{(p)} u_{g,i}u_{l,i}^{(p)} - m_l^{(p)} C_{p,l} E_T^{(p)} \\ + \frac{m_l^{(p)}}{\tau_p^{(p)}}\left(u_{l,i}^{(p)} - u_{g,i}\right)u_{g,i} \end{pmatrix} \tag{27}$$

where E_g is the total energy and $Q_{g,ij}$ is the heat flux.

In the LES approach, liquid and gas equations are filtered through a Favre averaging procedure (Moreau et al. (2010)). The resulting set of equations for the liquid phase is:

$$\frac{\partial}{\partial t}\overline{m}_l^{(p)} + \frac{\partial}{\partial x_m}\overline{m}_l^{(p)}\widehat{u}_{l,m}^{(p)} = \widehat{E}^{(p)}(1) \tag{28}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\overline{m}_l^{(p)}\widehat{u}_{l,i}^{(p)} + \frac{\partial}{\partial x_m}\overline{m}_l^{(p)}\widehat{u}_{l,i}^{(p)}\widehat{u}_{l,m}^{(p)} = \widehat{E}^{(p)}(u_{l,i}^{(p)}) - \frac{\overline{m}_l^{(p)}}{\tau_p}\left(\widehat{u}_{l,i}^{(p)} - \widehat{u}_{f@l,i}\right) + \Omega_i^{(p)} \tag{29}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\overline{m}_l^{(p)}\widehat{\delta\Theta}_l^{(p)} + \frac{\partial}{\partial x_m}\overline{m}_l^{(p)}\widehat{\delta\Theta}_l^{(p)}\widehat{u}_{l,m}^{(p)} = \widehat{E}^{(p)}(\delta\Theta_l^{(p)}) - 2\frac{\overline{m}_l^{(p)}}{\tau_p}\widehat{\delta\Theta}_l^{(p)} + \widehat{\Xi}^{(p)} \tag{30}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\overline{m}_l^{(p)}\widehat{H}_l^{(p)} + \frac{\partial}{\partial x_m}\overline{m}_l^{(p)}\widehat{H}_l^{(p)}\widehat{u}_{l,m}^{(p)} = \widehat{E}^{(p)}(H_l^{(p)}) + \overline{m}_l^{(p)} C_{p,l} E_T^{(p)} \tag{31}$$

where $\Omega_i^{(p)}$ and $\widehat{\Xi}^{(p)}$ are defined as:

$$\Omega_i^{(p)} = -\frac{\partial}{\partial x_m}\overline{m}_l^{(p)}\delta\widehat{R}_{l,im}^{(p)} - \frac{\partial}{\partial x_m}\overline{m}_l^{(p)}T_{l,im}^{(p)} \tag{32}$$

$$\widehat{\Xi}^{(p)} = -\overline{m}_l^{(p)}\left(\widehat{\delta R}_{l,ij}^{(p)} + T_{l,ij}^{(p)}\right)\frac{\partial}{\partial x_j}\widehat{u}_{l,i}^{(p)} - \frac{\partial}{\partial x_m}\overline{m}_l^{(p)}\widehat{\delta S}_{l,iim}^{(p)} \tag{33}$$

where $T_{l,ij}^{(p)}$ is the subgrid scale tensor modeled using a Smagorinski-Yoshizawa model (Moreau et al. (2010)). The resulting set of equations for the gas phase is:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_g + \frac{\partial}{\partial x_m}\rho_g \widehat{u}_{g,m} = \sum_{p=1}^{N} E_2^{(p)} \overline{m}_l^{(p)} \tag{34}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\rho_g \widehat{u}_{g,i} + \frac{\partial}{\partial x_m}\rho_g \widehat{u}_{g,i}\widehat{u}_{g,m} = \\ - \frac{\partial \widehat{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_m}\rho_g \nu_g \widehat{D}_{g,im} + \frac{\partial}{\partial x_m} T_{g,ij} \\ + \sum_{p=1}^{N}\left(\frac{\overline{m}_l^{(p)}}{\overline{\tau}_p^{(p)}}\left(\widehat{u}_{l,i}^{(p)} - \widehat{u}_{g,i}\right) + E_2^{(p)}\overline{m}_l^{(p)}\widehat{u}_{l,i}^{(p)}\right)\end{aligned} \tag{35}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\rho_g \widehat{E}_g + \frac{\partial}{\partial x_m}(\rho_g \widehat{E}_g + \widehat{P})\widehat{u}_{g,m} = \\ + \frac{\partial}{\partial x_m}\rho_g \nu_g \widehat{D}_{g,im}\widehat{u}_{g,i} + \frac{\partial}{\partial x_m}\overline{Q}_{g,ij} \\ + \sum_{p=1}^{N}\begin{pmatrix} E_2^{(p)}\overline{m}_l^{(p)}\widehat{u}_{g,i}\widehat{u}_{l,i}^{(p)} - \overline{m}_l^{(p)} C_{p,l} E_T^{(p)} \\ + \frac{\overline{m}_l^{(p)}}{\overline{\tau}_p^{(p)}}\left(\widehat{u}_{l,i}^{(p)} - \widehat{u}_{g,i}\right)\widehat{u}_{g,i}\end{pmatrix}\end{aligned} \tag{36}$$

where $T_{g,ij}$ is the subgrid scale tensor modeled using the WALE model (Nicoud et Ducros (1999)).

Numerical Context in the AVBP Code

The AVBP code solves compressible Navier-Stokes equation for reactive flows on unstructured grids in a cell-vertex formulation. To perform Large Eddy Simulations, a 3^{rd} order in time and space scheme is used (TTGC)(Colin et al. (2000)).

The eulerian liquid phase is similar to the eulerian gas phase in terms of equations, but has different behaviours. It is highly compressible, so that vacuum and strong gradients occurs. As the TTGC scheme doesn't preserve positivity, it encounters difficulties in such zones. A classical way to handle such numerical problems is to use artificial viscosity. This methodology has been applied to the simulation of a decaying Homogeneous Isotropic Turbulence (Vié et al. (2009)), and seems to be very accurate. However more adapted schemes are needed, like kinetic schemes in de Chaisemartin (2009). But their adaptation to unstructured cell vertex 3-dimensional formulation is not straightforward and requires important developments.

The MERCATO test rig

The test rig is an experimental swirl combustor (Fig. 1). Air is injected inside the plenum and enters the combustion chamber through the swirler. The liquid injection is located at the end of the swirler stage, and at the center of the swirled gaseous jet. The case studied is a two-phase evaporating flow without combustion. Pressure and temperature of the gas phase are 1bar and 463K. Experimental data obtained by PDA and LDA is available (Garcia-Rosa (2008)).

The injection system is a pressure-swirl atomizer. It generates a hollow cone spray with an half angle of $40°$ and orthoradial motion, which produces a polydisperse cloud of droplets. The NDF at 13mm downstream the injector is shown in Fig. 2. The injected fuel is a surrogate for kerosene JP10 for which thermodynamic and transport properties are taken from Boileau (2007).

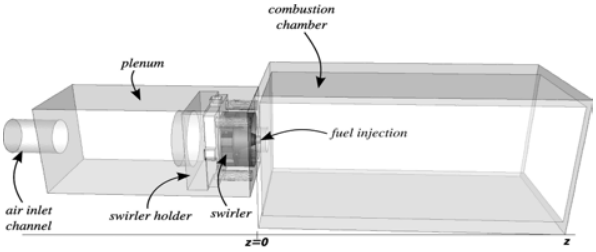


Figure 1: Scheme of the MERCATO test rig.

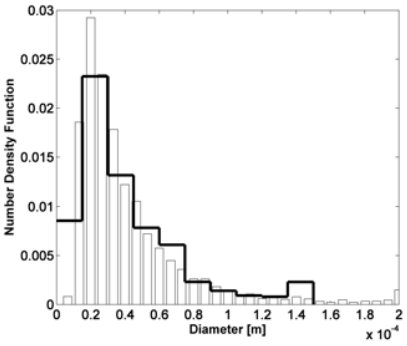


Figure 2: MERCATO: Number Density Function at 13mm downstream the injector location (histogram) and Multifluid representation with 10 sections (solid line).

Preliminary test cases

As evaporation modifies droplets size, it is a good test for a multifluid approach. Such test case was already

studied in Laurent (2006), Dufour et al. (2005), or de Chaisemartin (2009). The same evaporation conditions as in the MERCATO are used. Because of heating, no analytical solution is available but MEF and MMEF are compared. For MEF, the droplet distribution is reduced to a Dirac distribution around the mean diameter which evolves in time. For MMEF, the initial droplet distribution is discretized in sections, as shown on Fig. 2. The initial mean diameter (d10) is $55\mu m$. Figure 3 shows the time evolution of the liquid phase with MEF, which gives a total evaporation time of 50ms, with a heating time of 25ms. As MEF does not take into account the droplet number flux at size zero (as done for DQMOM in Fox et al. (2008)), the droplet number density is constant. Figure 4 shows the same quantites for MMEF, giving a total evaporation time of 400ms and a heating time of 150ms, respectively eight times and six times higher than from MEF. This is due to the presence of large droplets which heat and evaporate very slowly compared to smaller ones. As MMEF takes into account droplet number flux at size zero, the total droplet number decreases. Figure 4 also shows that the mean diameter does not become zero at the end of evaporation. This is due to the 1^{st} order of the multilfluid approach used here, which causes diffusion in phase space. This drawback was already shown in Laurent (2006), and can be tackle using higher order method with linear (Laurent (2006)) or exponential (Dufour et al. (2005)) reconstruction. This last one is a special case of a more general setting of Maximization of Entropy developped in Massot et al. (2010) and Kah et al. (2009). But this is not the scope of this work. This test case shows clearly that accounting for polydispersion is first order for the final application, as a monodisperse formalism highly underestimates heating and evaporation times.

Another interesting test case is related to drag, which also depend on droplet size and impacts the spatial dispersion. It is proposed here to analyse the spatial dispersion effects of a vortex having the same caracteristics than the swirl motion in MERCATO. The test case is then a two-dimensional frozen vortex, with a spatially homogeneous initial droplet distribution having the same velocity as the gas phase. Ten sections are used, with the same droplet number in each section. Radial velocity profile for the test case and in MERCATO at first position (13mm) are shown in Fig. 5. The computation is run for 5ms, which is the time needed by the liquid phase to impact the wall.

Figure 6 shows the number density and mean diameter radial profiles for both MEF and MMEF. After 5ms, droplet number density is widely distributed spatially in MMEF, while concentrated around 0.038m in MEF. Bigger droplets, due do the weaker influence of the gas phase, keep their initial velocity out of the vortex, and so

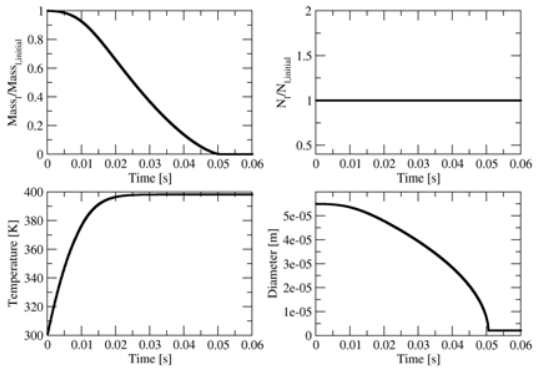


Figure 3: MEF Evaporation test case in MERCATO conditions. Evolution of total mass (upper left), droplet number density (upper right), liquid temperature (lower left) and mean diameter (lower right).

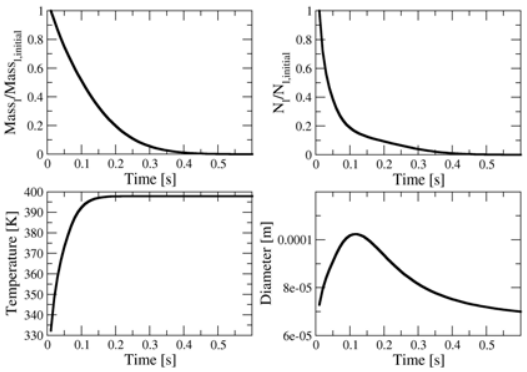


Figure 4: MMEF Evaporation test case in MERCATO conditions. Evolution of total mass (upper left), droplet number density (upper right), liquid temperature (lower left) and mean diameter (lower right).

their initial radial deviation. Small droplets are in equilibrium with the gas phase, so they reach a small velocity out of the vortex. The mean diameters are affected, with small diameters near the vortex center and big diameters far from. Two drawbacks are shown in Fig.6. The first drawback is linked to the mean diameter. In the center of the vortex, it is supposed to have no droplet, and so a mean diameter equal to zero. But the numerical scheme used here imposes to keep a low droplet number density, imposing a non-zero mean diameter. The second draw-

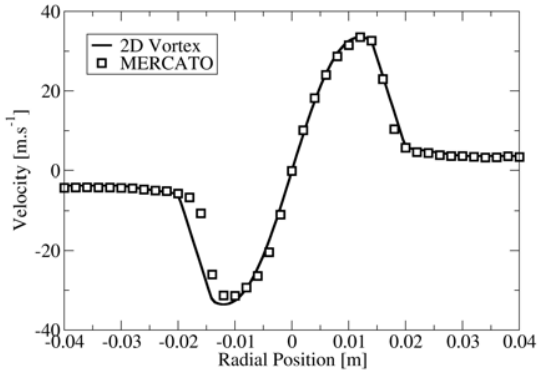


Figure 5: Gas velocity profile for the 2D vortex (solid line) and in MERCATO test case (13mm downstream the injection location)(squares).

back concerns the spatial dispersion. Considering drag force, each section behaves like its mean surface, and so follow only one trajectory. This is resulting in discrete accumulations for each class. In such a canonical test case, it seems to be relevant to tackle this issue. But in pratical cases, considering turbulent mixing and species diffusion , it has no effect on the fuel spatial dispersion.

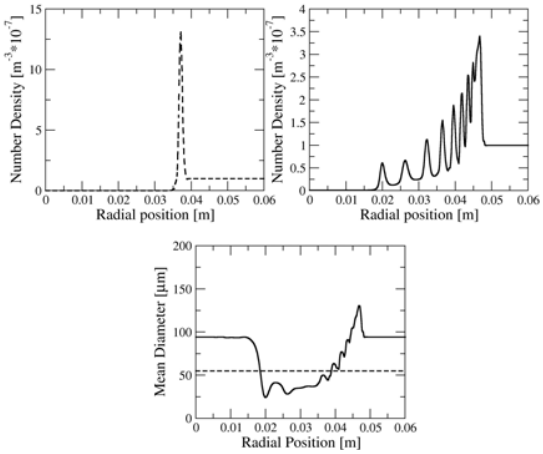


Figure 6: Radial distribution of droplet number density for MEF (top left) and MMEF (top right), and arithmetic mean diameter (bottom) for MEF (dashed line) and MMEF (solid line).

Simulation of the MERCATO test rig

Injecton is a keypoint in the simulation of two-phase flow burners. Then the injection system is modeled by the FIMUR model (Senoner et al. (2009a)), based on the model of Cossali (2000), and using autosimilarity assumptions for the velocity profiles. This model was initially designed for monodisperse injection, and the extension to multifluid injection is made by distributing the liquid volume fraction and droplet number density at all nodes over all diameters, following the size distribution of Fig. 2.

The computational domain is discretized with 1351767 tetrahedrons (Fig. 7). Averages are calculated during 40ms, which ensures statistical convergence.

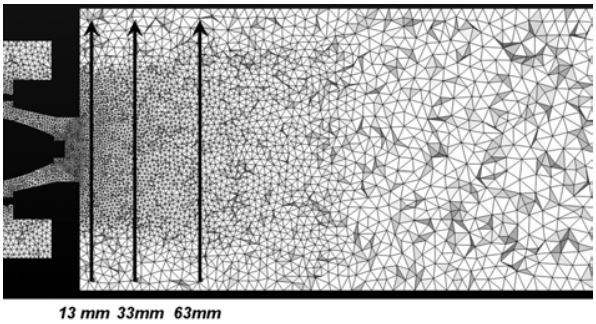


Figure 7: Mesh and velocity profiles position.

Figure 8 shows the total liquid volume fraction for MEF and MMEF computations. Firstly, due to its life time in a polydisperse framework (as shown in the evaporation test case), the liquid phase exists in the whole the combustion chamber for MMEF, whereas evaporates faster with the MEF. Secondly, due do the bigger inertia of large droplets, the liquid phase impacts the wall with MMEF, but not with the MEF.

Figure 9 shows the fuel mass fraction for MEF and MMEF computations, which is an important quantity for combustion. The two formalism lead to very different fuel repartitions. Due to the higher life time of droplet, the fuel mass fraction near the injection location is lower for the MMEF than for the MEF. More precisely, the high mass fraction zone around the injection location showed with MEF does not exist with the MMEF.

Velocity profiles at three downstream positions (13mm, 33mm and 63mm, Fig. 7) are compared to experimental data (Garcia-Rosa (2008)) for both MEF and MMEF results in Fig. 10-12. The axial velocity calculated with MEF and MMEF are in good agreement with experiments for the two first positions, and slightly underestimated inside the spray at the last position, although the outer zone is well captured by MMEF. Good

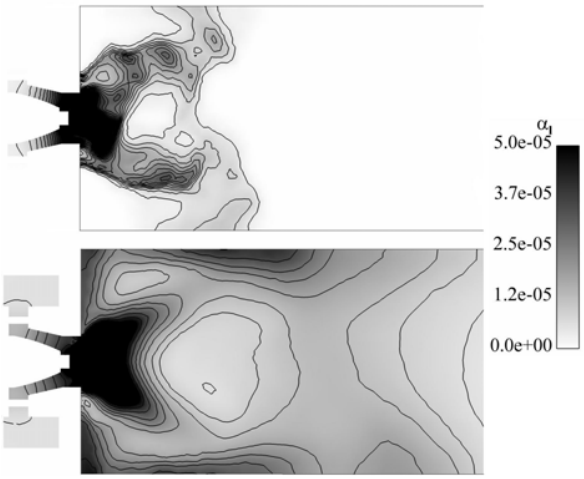


Figure 8: Instantaneous field of liquid volume fraction for MEF (up) and MMEF (down).

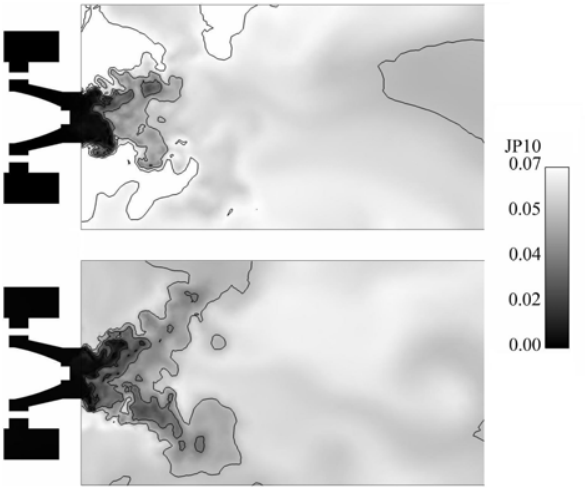


Figure 9: Instantaneous field of fuel mass fraction (JP10) for MEF (up) and MMEF (down).

agreement is also obtained for the radial velocity at the first position, but some discrepancies appear at the two other positions. MEF is not able to capture any behaviours, while MMEF reproduces the velocity in the outer zone. Finally, concerning the orthoradial velocity, it appears that MMEF reproduces the velocity profile accurately, while MEF catpures tendancies, but with less accurate results. Note that the good results for all velocity profiles at the first measurement location validate the injection methodology for both MEF and MMEF.

The Number Density Function (NDF) is compared to experimental data (Garcia-Rosa (2008)) at different points inside the burner (Fig. 13). Fig.14 shows that the NDF inside the spray (point 2) is well captured, whereas

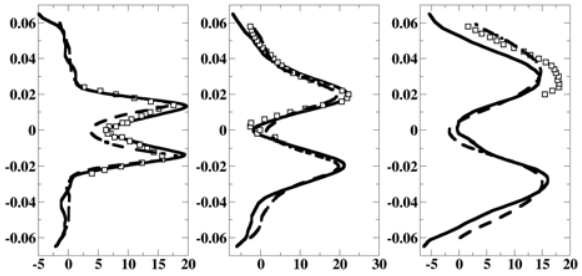


Figure 10: Axial velocity at 13mm (right), 33mm (center) and 63mm (left) for experiments (squares), MEF (full line) and MMEF (dashed line).

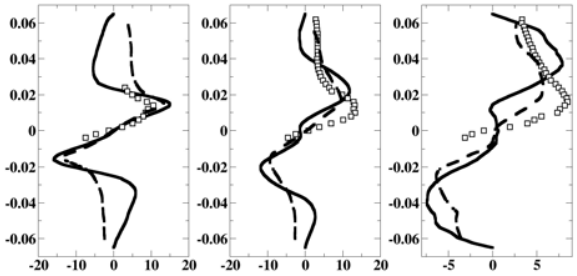


Figure 11: Radial velocity at 13mm (right), 33mm (center) and 63mm (left) for experiments (squares), MEF (full line) and MMEF (dashed line).

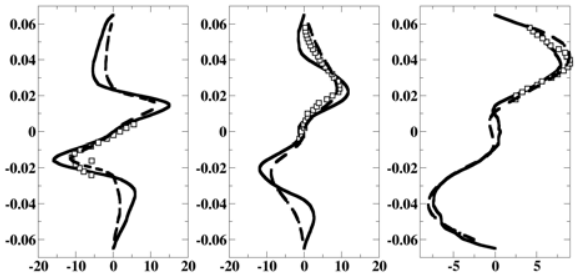


Figure 12: Orthoradial velocity at 13mm (right), 33mm (center) and 63mm (left) for experiments (squares), MEF (full line) and MMEF (dashed line).

the NDF in the center of the hollow cone (point 1) is shifted to big diameters. In Fig.15, the NDF in the center of the hollow cone (point 3) is not reproduced, but there the droplet number density is low both in measurements and computation. The NDF inside (point 4) and outside (point 5) the spray are well captured, with a good position of the maximum. In Fig.16, the NDF is well re-

produced at point 6 and point 8, especially considering the maximum. The NDF at point 7 is relatively well captured, but the position of the maximum is shifted to small diameters.

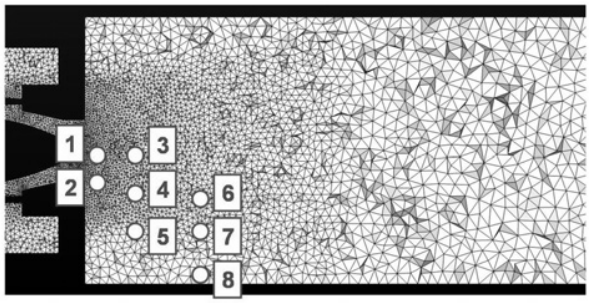


Figure 13: Mesh and NDF measurement location (circles)

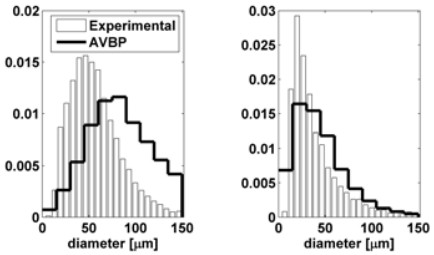


Figure 14: NDF at 13mm at point 1 (left) and point 2 (right) for MMEF (solid line) and experiment (histogram).

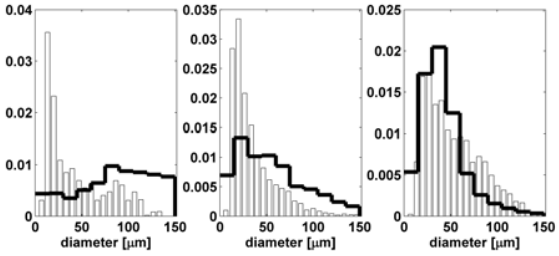


Figure 15: NDF at 33mm at point 3 (left), point 4 (center) and point 5 (right) for MMEF (solid line) and experiment (histogram).

Conclusions

Starting from the coupling of MEF and MA, the Multifluid Mesoscopic Eulerian Formalism (MMEF) has been

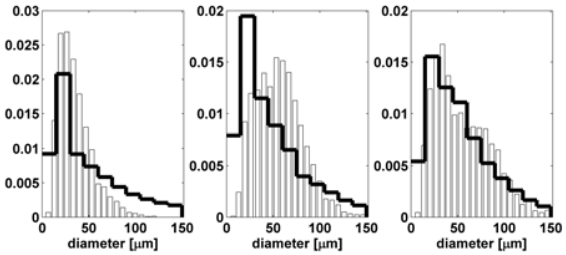


Figure 16: NDF at 63mm at point 6 (left), point 7 (center) and point 8 (right) for MMEF (solid line) and experiment (histogram).

derived. Preliminary test cases, designed to be representative of the final application, highlight the necessity to take into account polydispersion. However, they also show the limitation of numerical schemes used here to simulate a dispersed phase, especially in vaccum zones. Available numerical procedures allow to limitate the influence of this weakness.

Application of MMEF to the MERCATO test rig shows a good agreement between MMEF, MEF and experiments for velocity profiles at 9mm, making a good validation of the FIMUR injection strategy. For farther profiles (33mm and 63mm), MEF and MMEF show similar results in the central zone, but exhibit some discrepancies for the radial velocity. Only MMEF is able to capture the external zone, where mainly big droplets are present.

MMEF is also able to capture NDF profiles in the external zone (points 5 and 8). Results at other points show some discrepancies, although MMEF captures the global behaviour.

Such results confirm the necessity to take into account polydispersion in eulerian simulation of such aeronautical-type application. The main effect is the spatial segregation due to size/velocity correlations, which drive the drag force.

The next step of this work is to apply higher order multifluid approaches to the simulation of the MERCATO configuration. These methods use more than one moment for the liquid phase. As MEF is a two-moment method, the first step is to implement 2^{nd} order multifluid methods of Laurent (2006), Dufour et al. (2005). But the increase of order is coupled with the problem of the advection of moment sets, which needs to be adressed (Kah et al. (2009), Wright (2007)).

An other interesting and promising approach for such applications is the Direct Quadrature Method Of Moment Fox et al. (2008). In this approach, the pdf is not discretized into fixed sections, but is defined through a Gauss quadrature, and can be seen as a set of Diracs,

linked by a linear system. This approach has proven its ability to simulate evaporation and coalescence with very low diffusion in phase space, allowing to limit the number of Diracs compared to the number of sections needed by the classical multifluid approach. The original formalism has been extended by taking into account a velocity dispersion in Belt et al. (2009), and applied to the simulation of coalescence in Homogeneous Isotropic Turbulence in Wunsch et al. (2009).

Considering the evaporation, the strong influence of the droplet dissappearence with high order moment method or DQMOM is demonstrated in Fox et al. (2008). Modeled by a flux evaluated at zero size, a stable approach is shown in Fox et al. (2008), but its lack of precision needs further studies. A solution is proposed in Massot et al. (2010) with a high order moment method. In this approach, the pdf is defined by its four first moments. A reconstruction by Entropy Maximization allows to compute the evaporation flux at zero size. The pdf is then evaporated using an integrated formulation of the DQMOM approach. The robustness and the precision of this method has been proven in Massot et al. (2010), and make it a good candidate for final applications since it only involves one section, as long as the problem of moments set advection in complex industrial applications is addressed.

Acknowledgements

This research was supported by ANRT/IFP Ph.D. grant for A. Vié, DGA Ph.D. grant for M. Sanjosé.

References

Belt R.J. and Simonin O., Quadrature method of moments for the pdf modeling of droplet coalescence in turbulent two-phase flow, Proceedings of the ASME FEDSM 2009, FEDSM2009-78095, 2009

Boileau M., Simulations aux grandes échelles de l'allumage diphasique des foyers aéronautiques, Ph.D. thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2007

Colin 0. and Rudgyard M., Development of high-order Taylor-Galerkin schemes for unsteady calculations, Journal of Computational Physics, Vol. 162(2), pp. 338-371, 2000

Cossali G.E., An integral model for gas entrainment into full cone sprays, Journal of Fluid Mechanics, Vol. 439(2), pp. 353-366, 2001

De Chaisemartin S., Modèles eulériens et simulation de la dispersion turbulente de brouillards qui s'évaporent, Ph.D. thesis, Ecole Centrale Paris, 2009, available on TEL http://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00443982/en

Dufour G. and Villedieu P., A second-order multi-fluid model for evaporationg sprays, Mathematical Modelling and Numerical Analysis, Vol. 39(5), pp. 931-963, 2005

Février P., Simonin O. and Squires K.D., Partitioning of particle velocities in gas-solid turbulent flow into a continuous field and a spatially uncorrelated random distribution: theoretical formalism and numerical study, Journal of Fluid Mechanics, Vol. 533, pp. 1-46, 2005

Fox R.O., Laurent F. and Massot M., Numerical simulation of spray coalescence in an Eulerian framework: Direct quadrature method of moments and multi-fluid method, Journal of Computational Physics, Vol. 227, pp. 3058-3088, 2008

Garcia M., Development and validation of the Euler-Lagrange formulation on a parallel and unstructured solver for large-eddy simulation, Ph.D. thesis, Université de Toulouse, Toulouse, 2009, available on TEL http://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00414067/en/

Garcia-Rosa N., Phénomènes d'allumage d'un foyer de turbomachine en conditions de haute altitude, Ph.D. thesis, Université de Toulouse, Toulouse, 2008

Greenberg J.B., Silverman I. and Tambour Y., On the origin of spray sectional conservation equations, Combustion and Flame, Vol. 93, pp. 90-96, 1993

Kah D., Laurent F., Massot M. and Jay S., Modeling of polydisperse sprays using a high order method for numerical advection of size moments, 11th International Conference of Liquid Atomization and Spray Systems, Vail, USA, July 2009

Kaufmann A., Moreau M., Simonin O. and Helie J., Comparison between Lagrangian and mesoscopic Eulerian modelling approaches for inertial particles suspended in decaying isotropic turbulence, Journal of Computational Physics, Vol. 227(13), pp. 6448-6472, 2008

Kuo K., Principles of Combustion, Wiley-Interscience, New York, 2nd edition, 2005

Laurent F. and Massot M., Multi-fluid modeling of laminar poly-dispersed spray flames: origin, assumptions and comparison of sectional and sampling methods, Comustion Theory and Modelling, Vol. 5, pp. 537-572, 2001

Laurent F., Massot M. and Villedieu P., Eulerian multi-fluid modeling for the numerical simulation of coalescence in polydisperse dense liquid sprays,Journal of Computational Physics, Vol. 194, pp. 505-543, 2004

Laurent F., Numerical analysis of eulerian multi-fluid models in the context of kinetic formulations for dilute evaporating sprays, Mathematical Modeling and Numerical Analysis, Vol. 3, pp. 431-468, 2006

Masi E., Riber E., Sierra P., Simonin O. and Gicquel L.Y.M., Modeling the random uncorrelated velocity stress tensor for unsteady particle eulerian simulation in turbulent flows, International Conference on Multiphase Flow, Tampa, US, 2010

Massot M., Knikker R., Péra C. and Réveillon J., Lagrangian/Eulerian analysis of the dispersion of evaporating droplets in a non-homogeneous turbulent flow, International Conference on Multiphase Flow, Yokohama, Japan, 2004

Massot M., Eulerian Multi-Fluid Models for Polydisperse Evaporating Sprays, CISM - International Centre for Mechanical Sciences - Courses and Lecture Series, Vol. 492, 2007

Massot M., Laurent F., Kah D. and de Chaisemartin S., A robust moment method for evaluation of the disappearance rate of evaporating sprays, SIAM Journal of Applied Mathematics, 2010, available on HAL http://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00332423/en/

Moreau M., Bédat B. and Simonin O., Development of gas-particle euler-euler LES approach: a priori analysis of particle sub-grid models in homogeneous isotropic turbulence, Flow Turbulence and Combustion, Vol. 84(2), pp.295-324, 2010

Nicoud F. and Ducros F., Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient, Flow Turbulence and Combustion, Vol. 62(3), pp.183-200, 1999

Réveillon J., Massot M. and Péra C., Analysis and modelling of the dispersion of vaporizing polydispersed sprays in turbulent flows, Center of Turbulence Research, Proceedings of The Summer Program, 2002

Sanjosé M., Lederlin T., Gicquel L., Cuenot B., Pitsch H., Garcia-Rosa N., Lecourt R. and Poinsot T., LES of two-phase reacting flows, Center of Turbulence Research, Proceedings of The Summer Program, 2008

Sanjosé M., Évaluation de la méthode Euler-Euler pour la simulation numérique aux grandes échelles des chambres à carburant liquide , Ph.D. thesis, Université de Toulouse, Toulouse, 2009

Sazhin S.S., Advanced models of fuel droplet heating and evaporation, Progress in Energy and COmbustion Sciences, Vol. 32, pp.162-214, 2006

Senoner J.M., Sanjosé M., Cuenot B. and Poinsot T., A methodology to model fuel injection by pressure-swirl atomizer for large eddy simulation of real combustion chamber, to be submitted to American Institute of Aeronautics and Astronautics Journal, 2009a

Senoner J.M., Sanjosé M., Lederlin T., Jaegle F., Garcia M., Riber E., Cuenot B., Gicquel L., Pitsch H. and Poinsot T., Eulerian and lagrangian large eddy simulations of an evaporating two-phase flow, Compte rendu de l'Academie des Sciences, Vol. 337(6-7),pp. 458-468, 2009b

Sirignano W.A., Fluid dynamics and transport of droplets and sprays, Cambridge University Press, New York, USA, 1999

Vié A., Martinez L., Jay S., Benkenida, A. and Cuenot B., Validation of the eulerian mesoscopic approach in particle-charged homogeneous isotropic decaying turbulence in the scope of large eddy simulation of fuel sprays, 11th International Conference of Liquid Atomization and Spray Systems, Vail, USA, July 2009

Williams F.A., Spray Combustion and atomization, Physics of Fluids, Vol. 1, pp.541-545, 1958

Wright D.L., Numerical advection of moments of the particule size distribution in Eulerian models, Journal of Aerosol Science, pp. 352-369, 2007

Wunsch D., Belt R.J., Fede P. and Simonin O., DNS/DPS of inertial droplet coalescence in Homogeneous Isotropic Turbulence and comparison with pdf model predictions using the direct quadrature method of moments, Proceedings of the ASME FEDSM 2009, FEDSM2009-78091, 2009