



Modélisation Eulérienne de l'Atomisation Haute Pression - Influences sur la Vaporisation et la Combustion Induite

Romain Lebas

► To cite this version:

Romain Lebas. Modélisation Eulérienne de l'Atomisation Haute Pression - Influences sur la Vaporisation et la Combustion Induite. Milieux fluides et réactifs. Université de Rouen, 2007. Français. NNT: . tel-00707588

HAL Id: tel-00707588

<https://theses.hal.science/tel-00707588>

Submitted on 13 Jun 2012

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.

THESE

Présentée à la :

Faculté des Sciences de l'Université de Rouen

En vue de l'obtention du grade de :

Docteur de l'Université de Rouen

Discipline : Physique
Spécialité : Energétique

Par :

Romain Lebas

Ingénieur INSA de Rouen
DEA d'Energétique et d'Aérothermochimie

Modélisation Eulérienne de l'Atomisation Haute Pression Influences sur la Vaporisation et la Combustion Induite

Soutenue le : **26 octobre 2007**

Composition du jury

Rapporteurs :

Francis Dupoirieux	Maître de recherche - ONERA de Palaiseau
Benoît Oesterlé	Professeur des Universités - ESSTIN de Nancy

Examineurs :

Alain Berlemont	Directeur de recherche - CNRS
Roland Borghi	Professeur des Universités - Ecole Centrale de Marseille

Membres invités :

Grégory Blokkeel	Ingénieur de recherche - PSA Peugeot - Citroën
Alexandre Raulot	Ingénieur de recherche - AVL France

Directeur(s) de thèse :

François - Xavier Demoulin	Maître de Conférences - Université de Rouen
Mikhael Gorokhovskiy	Professeur des Universités - Ecole Centrale de Lyon

Je dédie ce manuscrit à mon Papa, *Rémi* et ma Marraine, *Annick*,
qu'ils boivent un peu de vie dans *ces écrits*...

“Les morts n’ont plus que les vivants pour ressource. Nos pensées sont pour eux les seuls chemins du jour. Eux qui nous ont tant appris, eux qui nous semblent s’être effacés pour nous et nous avoir abandonné toutes leurs chances, il est juste et digne de nous qu’ils soient pieusement accueillis dans nos mémoires et qu’ils boivent un peu de vie dans nos paroles.”

Paul Valéry, extrait du *Discours de réception*
à l’Académie française au fauteuil d’Anatole France.

Une définition originale des formalismes eulérien et lagrangien :

“Ce que je sais, en physique, c’est que pour un homme se tenant sur la berge, le temps passe plus vite que pour celui qui se trouve sur le bateau - surtout si ce dernier est avec sa femme”

Woody Allen, extrait de *L’erreur est humaine* - mai 2007.

Remerciements

Durant ces trois années de thèse, je me suis toujours dit que j'éprouverai un certain plaisir à écrire mes remerciements. Quand on écrit ses remerciements, cela signifie que c'est terminé. C'est déjà une bonne raison en soit. Mais c'est probablement aussi la seule occasion qu'il nous est donné dans la vie de remercier solennellement des personnes importantes à nos yeux. Alors voilà.

Il y a les incontournables comme les membres du jury de soutenance, qui se sont déplacés des quatre coins de la France pour évaluer mes travaux de recherche. Je souhaiterais donc remercier Francis Dupoirieux et Benoît Oesterlé pour avoir accepté de rapporter ce manuscrit de thèse. Je joins à ces remerciements Alain Berlemont et Roland Borghi pour avoir examiné mon travail.

Alexandre Raulot était mon interlocuteur chez AVL France, l'entreprise responsable du logiciel de *CFD* utilisé par PSA Peugeot Citroën. J'ai eu la charge de développer un modèle complet d'atomisation et d'évaporation dans ce logiciel. Sans Alexandre, cela n'aurait pas été possible. Sa compétence et ses idées toujours intéressantes m'auront aidé tout au long de ma thèse. Je l'en remercie vivement.

Peu de doctorants ont la chance d'avoir un encadrant industriel qui comprend parfaitement le développement des travaux de thèse. J'ai fait partie de cette espèce rare : Grégory Blokkeel a toujours su écouter quand il le fallait. Merci.

François-Xavier Demoulin a le droit à son petit paragraphe personnel. Il a été mon encadrant scientifique au laboratoire pendant ces trois ans. C'est une personne qui possède des qualités humaines remarquables : patient, compréhensif, tolérant. Il a toujours une idée originale à proposer et c'est à mes yeux la première des qualités d'un chercheur. Il ne tardera pas à obtenir son Habilitation à Diriger les Recherches car il a déjà à mon sens toutes les qualités requises. Mikhael Gorokhovski, mon directeur de thèse "officiel", en est le premier convaincu. Je remercie ces deux personnes pour m'avoir fait évoluer dans un environnement scientifique de haut niveau.

Je tiens également à remercier Mourad Boukhalfa, le directeur du CNRS UMR 6614 CORIA (Complexe de Recherche Interprofessionnelle en Aérothermochimie) où j'ai évolué pendant ces trois ans avec beaucoup de sérénité et de confort. Ce laboratoire est un véritable havre de paix. Certaines personnes n'y sont pas étrangères comme Anne-Marie Pinto ou Vanessa Picard du service de gestion et de comptabilité, Christophe Letailleur et son sens de l'organisation, Hugues Aroux pour son service

de repographie de qualité ou encore le service informatique que j'ai souvent ennuyé avec mes requêtes quant aux versions de compilateurs et de logiciels de post-traitement des résultats. C'est un juste retour des choses que ces personnes soient citées et remerciées ici.

Une thèse sans doctorants ne serait pas vraiment une thèse. Trois ans dans un laboratoire, ça crée des liens. Il y a d'abord ceux avec qui j'ai passé une bonne partie de mes pauses café sous un auvent du laboratoire, à l'extérieur, qu'il neige ou qu'il vente, car j'avais eu l'excellente idée de m'acoquiner à des fumeurs : Samuel Dubos, Julien Jarrige, Matthieu Lecompte, Jean-Bernard Lecourt, David Maligne, Alexandre Naudin, Xavier Paubel, Alexandre Tamion et Sébastien Tanguy. D'autres, avec qui c'était plus difficile car il fallait prendre d'autres pauses café pour sympathiser, mais cette fois-ci, à l'intérieur de la cafétéria du laboratoire : Linda Achour, Antoine Desportes, Kevin Gosse et Olivier Grondin. Ces "efforts" répétés pour avaler une telle quantité de café en valaient la peine : ce sont des gens formidables qui gagnent à être connus !

J'ai une pensée plus particulière pour ceux avec qui j'ai noué des liens plus forts, à qui je me suis greffé lors de moments un peu plus difficiles que les autres. J'entends par là des gens à l'écoute lors de longues soirées à refaire le monde. Julien Jouanguy, Sandra Payet, Cyprien Ternel ou encore Nicolas Fdida, Damien Studer et Thibaut Ménard. Je remercie toutes ces personnes pour leur soutien. Il m'a été précieux.

Pierre-Arnaud Beau a le droit à son aparté car il a joué un rôle particulier dans cette thèse. Il a été le premier thésard de François-Xavier et est arrivé quelques mois avant moi. Nos sujets de thèse étaient assez proches et cela nous a permis de nous entraider. Je le remercie pour toutes ces journées passées ensemble à se poser des questions, des plus simples au plus complexes, mais aussi pour ces moments passés en France et à l'étranger, lors des différents colloques et congrès où nous avons présenté nos travaux de recherche. De grands souvenirs.

Cette thèse s'est déroulée en partie chez PSA Peugeot Citroën, au Centre Technique de Vélizy, dans l'équipe de Physique de la Combustion, des Emissions et de la Lubrification gérée par Romain Lauvergne. Je souhaiterais tout d'abord le remercier de m'avoir accueilli au sein de son équipe. J'ai pu y évoluer dans une ambiance sereine et propice au travail. Renan Hilbert, Antonio Trueba, Anthony Le Negrate, Jérôme Soulas, Philippe Vars, Laurent Duchamp de la Geneste, Gabriel Cavallaro, François Dabireau ou encore Clément Dumand, Philippe Trouillet, Erwann Samson, Benoît Jeanne, Ludovic Nowak, Sébastien Houillé, Mehdi El Fassi, Fabrice Vidal, Jean Bouriot, Gilbert Blanchard, Karine Pajot et Marilyne Cousin sont les principaux protagonistes de cette bonne humeur générale qui régnait dans le bâtiment. Je les remercie chaleureusement !

Je ne peux oublier de penser à un certain nombre d'amis qui ont toujours été là quand j'en avais besoin : Soraya Bensadi, Philippe Cesari, Bénédicte Rinaldi, Philippe Raynaud, Yannick Taupas, Alexandre Thomas, Pierre Escande, Julien Périé et enfin Henri Mazué, Nausicaa Parenti et leur petit

bout de chou Keziah. Je voudrais qu'ils sachent que les voir ne serait-ce qu'une soirée ou un week-end me permettait de recharger les batteries. Et pour ça, je leur suis reconnaissant !

Les meilleurs pour la fin dit-on habituellement : ma famille.

Je pense à ma cousine Jacqueline tout d'abord, à sa gentillesse et sa générosité, sa grandeur d'âme. Mon oncle Jacques, avec qui j'ai partagé tant de choses, les week-ends comme les vacances d'été à la campagne. J'espère que l'on en partagera encore autant à l'avenir.

Je garde le mot de fin pour ma Maman, véritable tour protectrice d'une famille dont le nombre de membres ne fait que diminuer, inlassablement. Si j'ai appris de quelqu'un, c'est bien d'elle : abnégation et courage sont ses maître-mots. Je lui dois tout, mon éducation, mes connaissances, l'environnement dans lequel j'évolue. Elle constitue pour moi, encore aujourd'hui, la plus belle école qui soit.

Table des matières

Remerciements	v
Table des matières	ix
Nomenclature	xiii
Avant-propos	1
1 Fractionnement d'un jet liquide - physique du phénomène	7
1.1 Observations expérimentales	7
1.1.1 Mise en évidence de la présence d'un cœur liquide	7
1.1.2 Influence de l'écoulement dans l'injecteur sur le développement du jet	9
1.2 Une nouvelle approche : l'expérience numérique	10
1.3 Caractérisation physique de la rupture d'un jet liquide	13
1.3.1 Introduction des nombres adimensionnels caractéristiques d'un jet liquide turbulent	14
1.3.2 Introduction aux différents régimes de fractionnement d'un jet liquide	15
1.3.3 Théorie linéaire des instabilités appliquée au fractionnement d'un jet liquide	19
1.3.4 Conclusions sur l'analyse linéaire des instabilités	22
2 Revue des modèles d'atomisation actuels	25
2.1 Les différentes approches possibles	25
2.1.1 L'équation de Williams	25
2.1.2 L'approche lagrangienne	26
2.1.3 L'approche eulérienne	27
2.1.4 Autres méthodes de résolution	28
2.2 Les lois de comportement individuel de type "goutte"	29
2.2.1 Transfert de quantité de mouvement et positionnement des gouttes	29
2.2.1.1 Loi de traînée	29
2.2.1.2 Dispersion turbulente	30
2.2.2 Transfert de masse et de chaleur	30

2.2.2.1	Dynamique des gouttes	31
2.2.2.2	Autour de la goutte	31
2.2.2.3	Méthodologie - algorithme de calcul	34
2.2.3	Modélisation lagrangienne du fractionnement d'un jet liquide	35
2.2.3.1	Modèles de fractionnement primaire	35
2.2.3.2	Modèles de fractionnement secondaire	40
2.3	Bilan sur les limitations des approches standards	45
3	Le modèle Euler - Lagrange pour les Sprays et l'Atomisation	47
3.1	Modélisation de la turbulence diphasique et de la dispersion du liquide	48
3.1.1	Moyenne de Reynolds et moyenne de Favre	48
3.1.2	Introduction de la densité moyenne de mélange liquide/gaz	49
3.1.3	Transport de la fraction massique de liquide	49
3.1.4	Conservation de la quantité de mouvement moyen	49
3.1.5	Modélisation de la turbulence moyenne du mélange liquide/gaz	50
3.2	Transport de la densité d'interface liquide/gaz	52
3.3	Les échanges thermique et massique avec le gaz environnant	54
3.3.1	Modélisation de la dispersion du carburant évaporé	54
3.3.2	Transport de l'enthalpie massique du liquide	55
3.3.3	Implémentation du modèle <i>ELSA</i> dans le code AVL Fire	55
3.3.3.1	Modification de l'équation de transport de l'enthalpie sensible du gaz	56
3.3.3.2	Implication partielle des termes source	57
3.4	Contribution de l'approche lagrangienne dans le modèle	59
4	Modélisation du transport de la densité d'interface liquide/gaz	61
4.1	Construction de l'équation de transport de la densité d'interface liquide/gaz	62
4.1.1	Transport d'interface réactive : surface de flamme	62
4.1.1.1	Equation exacte de transport d'interface réactive	62
4.1.1.2	Modélisation de l'équation de transport de la densité moyenne de surface de flamme	62
4.1.2	Transport de la densité d'interface liquide/gaz	63
4.1.2.1	Adaptation des lois d'évolution de gouttes	63
4.1.2.2	Modélisation sans hypothèse de phase dispersée	67
4.2	Proposition d'une équation de transport de la densité d'interface liquide/gaz	74
4.2.1	Lien entre les parties dense et diluée d'un spray	74
4.2.2	Modélisation en zone dense du spray	76
4.2.3	Modélisation en zone diluée du spray	78
4.2.4	Bilan sur la modélisation proposée dans cette étude	82

5	Fermeture des termes de flux turbulents	85
5.1	Fermeture au premier ordre	85
5.2	Fermeture au second ordre	87
5.2.1	Modèle monophasique de turbulence à densité variable	87
5.2.2	Modèle “quasi multiphasique” de glissement entre phases	88
5.3	Fermeture hybride Euler - Lagrange	90
5.3.1	Contexte d’étude	90
5.3.2	Description de la méthode	93
5.3.2.1	Couplage Euler vers Lagrange	94
5.3.2.2	Couplage Lagrange vers Euler	95
6	Validations du modèle <i>ELSA</i> - Applications et Résultats	99
6.1	Comparaisons DNS - <i>ELSA</i> près de l’injecteur	101
6.1.1	Principes des méthodes utilisées pour le suivi d’interface	101
6.1.2	Conditions de calcul	102
6.1.3	Etude comparative	104
6.1.4	Bilan de l’étude comparative DNS - <i>ELSA</i>	107
6.2	Calculs de sprays Diesel sans vaporisation	111
6.2.1	Conditions de calcul	111
6.2.2	Influence du couplage Euler - Lagrange	112
6.2.3	Influence du niveau de turbulence à la sortie de l’injecteur	120
6.2.4	Influence du niveau de raffinement du maillage	127
6.2.5	Influence du modèle de rupture secondaire	132
6.2.6	Bilan des calculs de sprays Diesel sans vaporisation	132
6.3	Calculs de sprays Diesel vaporisant	135
6.3.1	Présentation de la base expérimentale	135
6.3.2	Conditions de calcul	136
6.3.3	Comparaisons avec les expériences	137
6.3.4	Bilan des calculs de sprays Diesel avec vaporisation	144
6.4	Calculs de sprays Diesel en combustion	147
6.4.1	Présentation du modèle de combustion	147
6.4.2	Influence de la taille du trou de l’injecteur	148
6.4.3	Calculs sur la base expérimentale de Siebers	153
6.4.4	Bilan des calculs de sprays Diesel en combustion	155
6.5	Conclusions sur les validations du modèle <i>ELSA</i>	155
	Conclusion générale et perspectives	159
	Bibliographie	163

Nomenclature

Lettres latines

A	Aire interfaciale
C	Constante
C_D	Coefficient de décharge
C_p	Capacité calorifique massique à pression constante
D	Coefficient de diffusion ou Diamètre
f	Fonction de densité de probabilité
F	Force
h	Enthalpie sensible massique ou Fonction Heaviside
k	Energie cinétique turbulente
L	Longueur
m	Masse
N	Densité volumique de gouttes
Nu	Nombre adimensionnel de Nusselt
Oh	Nombre adimensionnel d'Ohnesorge
P	Pression
Pr	Nombre adimensionnel de Prandtl
Q	Quantité de chaleur
R	Constante des gaz parfaits
Re	Nombre adimensionnel de Reynolds
S	Surface
Sc	Nombre adimensionnel de Schmidt
Sh	Nombre adimensionnel de Sherwood
t	Temps
T	Température
u, v, w	Composantes de la vitesse
x, y, z	Coordonnées spatiales
Y	Fraction massique

Lettres grecques

δ	Fonction Dirac ou symbole de Kronecker
ϵ	Dissipation turbulente
θ	Angle
κ	Courbure
μ	Viscosité dynamique
ν	Viscosité cinématique
ρ	Densité volumique
σ	Tension de surface
Σ	Densité volumique d'interface (liquide/gaz)
ϕ	Richesse
Ψ	Fonction indicatrice dense/dilué
Ω	Densité massique d'interface (liquide/gaz)

Indices & Exposants

X_{2ndBU}	Rupture secondaire de goutte
X_{bu}	Rupture de goutte
$X_{coll.}$	Collision
$X_{coal.}$	Coalescence
X_{crit}	Critique
X_d	Goutte
X_{eff}	Efficace
X_{eq}	Equivalent
X_g	Gaz
$X_{i,j,k}$	Directions de l'espace
X_{inj}	Injection
X_l	Liquide
X_{mix}	Mélange
X_p	Particule
X_{ref}	Référence
$X_{r,rel}$	Relatif
X_t	Turbulent
$X_{v,vap}$	Vapeur
X^E	Euler
X^L	Lagrange

Avant-propos

L'inventeur du moteur à allumage par compression, Rudolf Diesel, était mû par la volonté de remplacer la machine à vapeur brûlant du charbon par un moteur avec un rendement plus élevé mais aussi plus propre. Ces considérations demeurent d'actualité aujourd'hui plus qu'hier. En effet, à partir de la seconde moitié du XX^{ème} siècle, l'origine de la pollution a changé et aujourd'hui, le nombre de véhicules s'accroissant fortement avec l'essor de pays émergents tels que la Chine ou l'Inde, le trafic automobile est devenu un facteur prépondérant dans la qualité de l'air que nous respirons. La volonté du législateur en matière de respect de l'environnement s'est ainsi fortement accrue lors des quinze dernières années, notamment avec l'introduction en Europe des normes EURO (figure 1).

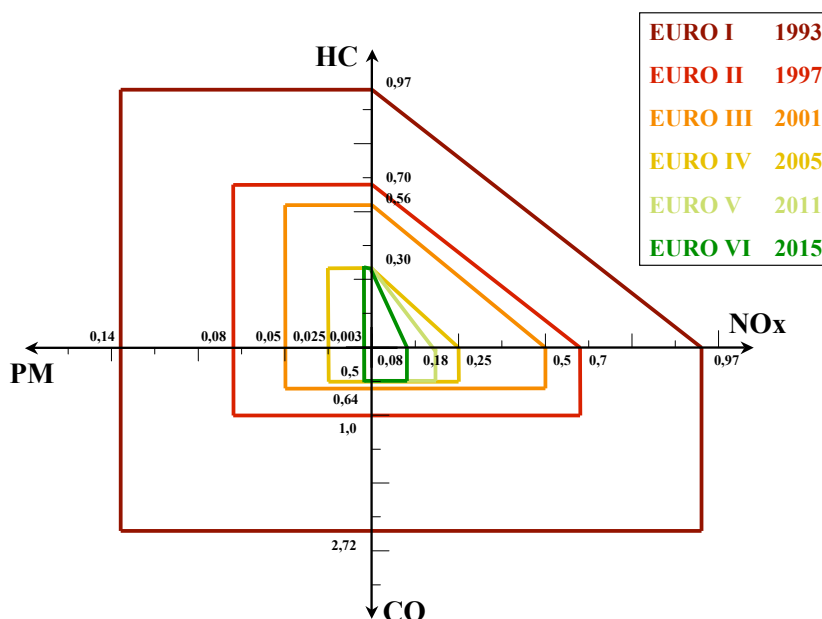


FIG. 1 – Diagramme d'évolution temporelle des normes européennes sur les émissions polluantes des moteurs Diesel - HC pour hydrocarbures imbrûlés, NO_x pour oxydes d'azote, CO pour monoxydes de carbone et PM pour particules fines

Les transports routiers sont à l'origine de plusieurs dizaines de millions de tonnes d'émissions polluantes qui représentent, selon les composants, une part de 10 à 75% des émissions totales. Si l'essor de nouvelles énergies renouvelables et/ou peu polluantes (pile à combustible, énergie solaire,

etc.) peut à terme réduire les taux d'émission de polluants dans l'air, la production d'énergie est, et restera pour quelques temps encore, basée sur le pétrole.

Or, les réserves mondiales de brut (c'est-à-dire la quantité de pétrole que les experts sont certains de pouvoir extraire de façon économique) se montent à environ 700 milliards de barils, sur lesquels quelques 360 milliards se trouvent au Moyen-Orient. Aux Etats-Unis, les réserves connues ne sont que de 27 milliards de barils, ce qui, au rythme de production national actuel, représente moins d'une décennie de réserve.

Pollution et consommation sont donc deux problèmes intimement liés et font l'enjeu d'énormes investissements de la part des constructeurs automobiles. Une grande partie de ces investissements vise à améliorer notre connaissance des nombreux phénomènes physiques liés aux moteurs. En remontant le processus de pollution à l'envers, il apparaît clairement qu'une diminution des émissions polluantes et de la consommation de carburant repose d'abord sur une optimisation du processus de combustion du carburant. Pour réduire le taux d'hydrocarbures imbrûlés, il est nécessaire d'avoir une connaissance précise de la répartition du carburant dans la chambre de combustion. Que l'on parle d'injection "indirecte" ou "directe", cette répartition du carburant est le résultat final du processus de transformation du jet de carburant en un spray de fines gouttelettes. Ce processus est appelé *atomisation*.

Pour étudier un tel phénomène physique, deux voies sont possibles : l'étude expérimentale ou la simulation numérique. Les méthodes de diagnostic optique permettent aujourd'hui la connaissance des écoulements présents dans un moteur à combustion. Cependant, une caractérisation précise en trois dimensions reste encore délicate à obtenir. De plus, les sprays Diesel sont optiquement denses et les conditions atmosphériques dans la chambre de combustion (température et pression importantes) ne facilitent pas la tâche de l'expérimentateur.

La simulation numérique devient une voie d'analyse des phénomènes physiques de plus en plus utilisée. Elle permet l'accès à l'ensemble de l'écoulement dans la chambre de combustion, mais également en amont (admission d'air, écoulement dans l'injecteur) et en aval (échappement des gaz, dépollution). Il existe différents outils de simulation numérique 3D.

La Simulation Numérique Directe (DNS pour *Direct Numerical Simulation*) permet, à l'aide de schémas numériques précis, de simuler l'intégralité des échelles de l'écoulement, sans aucune modélisation des équations de Navier - Stokes. Cet outil est très efficace pour la compréhension des phénomènes physiques car il permet d'avoir accès à l'ensemble des données physiques caractérisant l'écoulement. Il nécessite cependant une discrétisation très fine en espace et en temps et restreint donc la plupart du temps son utilisation à l'étude de cas académiques.

La Simulation aux Grandes Echelles (LES pour *Large Eddy Simulation*) propose une simulation des grandes échelles avec une modélisation des plus petites échelles de l'écoulement (ou "modèles de sous-maille"). Cette approche est très prometteuse car elle permet par exemple, dans le cas d'une utilisation en conditions moteur, de capturer des phénomènes qui varient d'un cycle moteur à l'autre.

La Simulation de type *RANS* (pour *Reynolds Averaged Navier - Stokes*) consiste à résoudre les équations de Navier - Stokes moyennées statistiquement et permet d'accéder aux grandeurs moyennées de l'écoulement étudié. Cet outil de simulation nécessite un plus grand effort de modélisation mais

permet des temps de calcul beaucoup moins importants qu'en LES ou DNS. Il est ainsi l'outil le plus utilisé dans la recherche automobile industrielle car son coût de mise en place et d'utilisation est le plus faible. C'est dans cette catégorie de simulations numériques que s'inscrit le travail présenté dans ce manuscrit.

Dans ce contexte, l'objectif de l'étude est de développer théoriquement un modèle eulérien d'atomisation de l'injection haute pression de type Diesel, d'y intégrer la modélisation des échanges thermique et massique et de l'implémenter numériquement dans le logiciel de *CFD* (pour *Computational Fluid Dynamics*) utilisé par PSA Peugeot Citroën afin de le rendre compatible avec les modèles de combustion déjà disponibles dans le code de calcul.

Plan du mémoire

Le présent document se compose de six chapitres : les deux premiers concernent une étude bibliographique portant sur la physique du phénomène de fractionnement d'un jet liquide et un état de l'art consacré aux différents modèles d'atomisation actuels. Les quatre derniers chapitres constituent l'essentiel de la contribution de ce travail : tout d'abord une description globale du modèle développé, ensuite deux points spécifiques sont abordés, concernant la modélisation de l'équation de transport de la densité d'interface liquide/gaz et la fermeture des termes de flux turbulents. Enfin, le manuscrit se termine par les validations et applications du modèle.

Chapitre 1 : Fractionnement d'un jet liquide - physique du phénomène

Le premier chapitre retrace les phénomènes essentiels liés à la rupture d'un jet liquide. Des constatations phénoménologiques obtenues à l'aide d'études expérimentales et numériques sont présentées. Les nombres adimensionnels caractéristiques d'un spray ou d'une goutte liquide sont introduits et une analyse linéaire des instabilités pour les différents régimes de rupture est proposée.

Chapitre 2 : Revue des modèles d'atomisation actuels

Le second chapitre est consacré à la description des différentes approches possibles pour la résolution de l'équation d'évolution de la fonction densité de probabilité d'un spray (ou équation de Williams). Les principes des approches lagrangienne et eulérienne sont présentés, en insistant sur les similitudes et les différences entre ces deux approches. Ensuite, les lois de comportement individuel de type "goutte" sont décrites en détails. La modélisation des échanges thermique et massique est approfondie dans le but d'une adaptation et d'une intégration dans le modèle eulérien développé dans cette étude. Enfin, ce chapitre s'achève sur une revue bibliographique des principaux modèles lagrangiens de spray. Un bilan sur les limitations de ces approches est également présenté et permet de dresser les grandes lignes de développement du modèle proposé dans cette étude.

Chapitre 3 : Le modèle Euler - Lagrange pour les Sprays et l'Atomisation

Ce troisième chapitre offre une description globale du modèle développé durant cette étude : le modèle *ELSA* (pour *Euler - Lagrange pour les Sprays et l'Atomisation*). Il permet une modélisation complète du spray, de l'intérieur de l'injecteur jusqu'en zone diluée, en prenant en compte la présence d'une zone dense de liquide près de la buse d'injection. Les principales équations du modèles sont présentées. Tout d'abord, l'équation de transport de la fraction massique de liquide est introduite. Un terme non fermé apparaît dans cette équation et sa modélisation est traitée au chapitre 5. Ensuite, l'équation de transport de la densité d'interface liquide/gaz est présentée. C'est une équation phénoménologique où chaque terme source correspond à un phénomène physique agissant sur la quantité d'aire interfaciale. Une attention particulière à la fermeture de cette équation est portée au chapitre 4. Enfin, la modélisation des échanges thermique et massique est introduite dans le modèle *ELSA* avec une équation de transport pour la fraction massique de vapeur de carburant ainsi qu'une équation de transport pour l'enthalpie massique de la phase liquide.

Chapitre 4 : Modélisation du transport de la densité d'interface liquide/gaz

Ce quatrième chapitre est essentiellement consacré à la modélisation du transport d'une interface et plus particulièrement du transport de la densité massique moyenne d'interface liquide/gaz. Une revue bibliographique des différents modèles ayant introduit tout d'abord une densité de surface de flamme puis une densité d'interface liquide/gaz est présentée. En tenant compte des limitations recensées dans cette revue bibliographique, une équation de transport de la densité d'interface liquide/gaz qui distingue les phénomènes physiques en zone dense de ceux en zone diluée est proposée.

Chapitre 5 : Fermeture des termes de flux turbulents

Le cinquième chapitre concerne les termes de flux turbulents dont la modélisation est nécessaire dans les équations de transport de la fraction massique de liquide et de la densité d'interface liquide/gaz. Un état de l'art des fermetures possibles de ces termes, au premier et au second ordre, est d'abord présenté. Ensuite, une méthode originale de couplage en zone diluée du spray entre les formalismes eulérien et lagrangien est proposée, permettant ainsi d'introduire le phénomène de traînée des gouttes dans le modèle *ELSA*.

Chapitre 6 : Validations du modèle *ELSA* - Applications et Résultats

Enfin, le dernier chapitre présente l'ensemble des validations du modèle. Une étude comparative avec des résultats de DNS en zone dense du jet, près de la buse d'injection est tout d'abord proposée. En seconde partie d'étude, plusieurs calculs *a priori*, sans prise en compte des échanges thermique et

massique, sont présentés afin d'étudier l'impact de certains paramètres physiques ou numériques sur le développement du jet dans la chambre. Ensuite, une validation du modèle est proposée pour des sprays Diesel vaporisant, à l'aide d'une base de données expérimentale où des mesures de pénétrations liquide et vapeur sont disponibles. Enfin, la dernière partie de l'étude concerne la modélisation de sprays Diesel en combustion. Des résultats de calculs où *ELSA* est couplé avec un modèle de combustion sont présentés. Une première série de calculs illustrant l'influence de la taille du trou de l'injecteur sur la combustion est proposée. Finalement, un cas de validation est présenté, basé sur des données expérimentales sur le positionnement de la flamme en régime stationnaire d'injection, en fonction des conditions thermodynamiques dans la chambre.

Chapitre 1

Fractionnement d'un jet liquide - physique du phénomène

Comprendre les phénomènes physiques mis en jeu lors du processus d'atomisation d'un jet liquide est primordial pour caractériser un spray dans une chambre de combustion. Cette problématique est très active depuis quelques années devant l'essor des moteurs à combustion interne à injection directe haute pression. De nombreuses études tant théoriques qu'expérimentales ont été menées pour mettre en évidence les aspects fondamentaux du fractionnement de jets liquides, notamment dans le cas d'injections de liquide à très grande vitesse comme le proposent Reitz et Bracco [1]. Cependant, aux vues de ces vitesses désormais usuellement utilisées dans les moteurs contemporains, que ce soit d'un point de vue théorique qu'expérimental, les phénomènes physiques rencontrés dans ce type de fractionnements sont difficilement identifiables et la caractérisation précise d'un jet liquide haute pression est très délicate.

1.1 Observations expérimentales

1.1.1 Mise en évidence de la présence d'un cœur liquide

En 1997, Fath *et al.* [2] réalisent des observations expérimentales du jet liquide près de la sortie de l'injecteur. En comparant le signal issu d'un cylindre liquide intact à celui issu d'un spray Diesel en zone dense, ils mettent en évidence la présence d'un cœur liquide intact en sortie d'injecteur, qui sera communément appelé par la suite "dard liquide". L'année suivante, Chang *et al.* [3] étudient également cette zone et, par tomographie laser, mettent en évidence une phase dispersée autour du cœur liquide, constituée de gouttelettes. Ils remarquent de plus que la longueur du dard liquide semble être indépendante des conditions expérimentales simulées.

Il est ainsi possible de représenter schématiquement un jet liquide haute pression (figure 1.1). Ce dernier peut donc être décrit comme étant constitué d'une zone dense de liquide où les quelques paquets liquides détachés du cœur liquide ont une forme indéterminée mais probablement non sphérique, et d'une zone diluée où par opposition, l'hypothèse de sphéricité des gouttes peut-être utilisée.

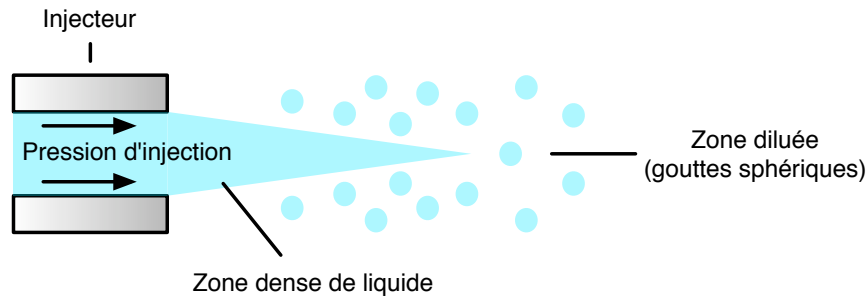


FIG. 1.1 – Représentation schématique d'un jet liquide haute pression, mettant en évidence la zone dense du jet près de la buse d'injection

Près du nez de l'injecteur, là où le cœur liquide est encore intact, d'autres techniques de mesure du type rayons X sont proposées depuis 2000, comme celle de Powell [4, 5, 6]. Elles permettent de pénétrer plus finement cette zone, pour ainsi quantifier une longueur de cœur liquide et établir un champ de valeurs de fraction volumique de liquide.

Plus en aval de l'écoulement, dans une zone où le jet liquide est principalement composé de gouttes détachées et sphériques, des outils expérimentaux comme le *Phase Doppler Analyser (PDA)* permettent d'extraire des informations sur la distribution de taille des gouttes ainsi que leurs composantes vitesses respectives. Cependant, ce type de mesures n'est réellement efficace (taux de validation proche de 100%) qu'à une distance minimale de cinquante voire cent diamètres de l'injecteur. Il est donc assez délicat de traiter de l'influence de phénomènes physiques qui apparaissent dans l'injecteur, ou près des lèvres de sortie de l'injecteur, grâce à ces mesures de taille de gouttes et de vitesses.

Hormis quelques études comme celles-citées plus haut, la zone proche du nez de l'injecteur reste extrêmement difficile à étudier expérimentalement. Ces difficultés viennent principalement du fait qu'il est très complexe d'accéder optiquement à cette région du spray car elle est très dense et fortement instable. Une source lumineuse orientée vers cette endroit du spray ne permet pas de mesures quantitatives tant les réflexions sont multiples. La plupart des résultats expérimentaux restent donc souvent qualitatifs près de la buse d'injection. Cependant, quelques techniques de mesure essayées récemment semblent être prometteuses :

- celles utilisant des lasers pulsés de durée ultra-courte, de type femtoseconde permettant de recueillir des informations sur la taille des gouttes dans le cas de jets liquides denses, Méès *et al.* [7] ;
- celles qui s'appuient sur la "*Laser Correlation Velocimetry*" (pour *LCV*) et qui permettent d'obtenir des champs de vitesse en zone dense du jet, comme le proposent Chaves *et al.* [8] ;
- celles se basant sur de la radiologie X comme propose Cai [9].

1.1.2 Influence de l'écoulement dans l'injecteur sur le développement du jet

Depuis quelques années, des auteurs comme Reitz [10], Huh [11] et plus récemment Stahl [12, 13] mettent en évidence l'influence de l'écoulement dans la buse d'injecteur sur le développement du spray dans la chambre de combustion. Cet écoulement est bien entendu la conséquence directe de géométries de plus en plus complexes dans les injecteurs. Ces contraintes peuvent générer des profils spatiaux de turbulence et de vitesse de la phase liquide très hétérogènes en sortie d'injecteur, voire même de la cavitation dans certaines conditions d'utilisations et en présence de certaines buses d'injecteur.

Stahl *et al.* mettent en évidence dans un premier temps en 2005 [12] l'influence de la géométrie interne de la buse d'injecteur, le débit injecté, et donc indirectement le niveau de turbulence, sur le développement du jet. Comme le montre la figure 1.2, la topologie du spray est fortement modifiée d'un cas à l'autre : l'angle de spray augmente avec le niveau de turbulence et à l'opposé, la longueur de déstabilisation du jet décroît lorsque le niveau de turbulence augmente.

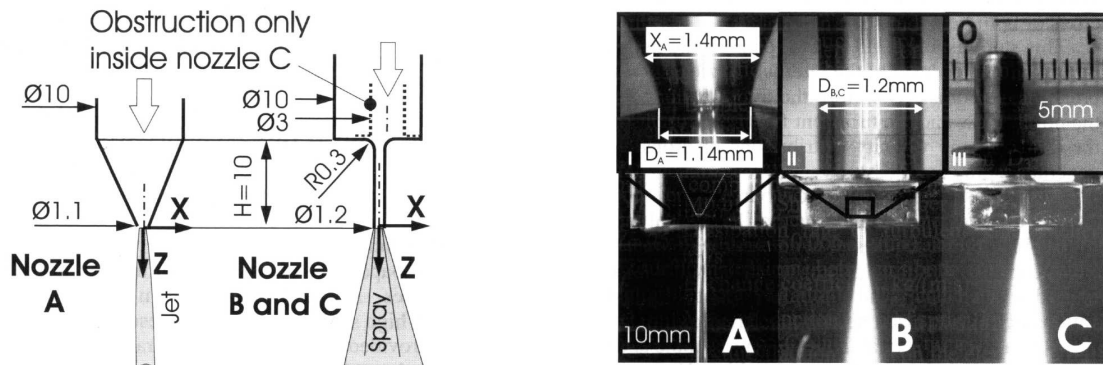


FIG. 1.2 – Influence de la géométrie de l'injecteur, du débit injecté et du niveau de turbulence sur le développement du spray dans la chambre de combustion - Stahl *et al.* [12]

L'année suivante, ces mêmes auteurs présentent une étude [13] se focalisant plus particulièrement sur l'influence de l'ajout d'un insert à l'intérieur de la buse sur la rupture du jet en aval de l'écoulement, comme le montre la figure 1.3. Avec et sans cet insert, les auteurs font varier le débit injecté et des tendances se dégagent : elles sont conformes à celles issues des expérimentations présentées précédemment en termes d'angle de spray et de longueur de déstabilisation. L'ajout de cet insert contraint fortement l'écoulement et peut déclencher un phénomène de cavitation dans la buse, à savoir la formation d'une poche de carburant vapeur due à la chute de pression en dessous de la pression de vapeur saturante. Les conséquences d'un tel phénomène sont multiples. Les principales sont une augmentation de la turbulence et de la vitesse de la phase liquide, en considérant la réduction de la section de passage du liquide. Stahl *et al.* montrent aussi que cette poche de cavitation peut déstabiliser le jet plus tôt, et de manière dissymétrique par rapport à l'axe d'injection.

De nombreuses études sont menées à ce sujet, Saliba [14, 15] propose une visualisation du phénomène à l'aide d'un injecteur transparent (figure 1.4). Plus tôt, Reitz [16] mettait en évidence que le phénomène de cavitation, augmentant la vitesse en sortie d'injecteur, pouvait accentuer le phénomène

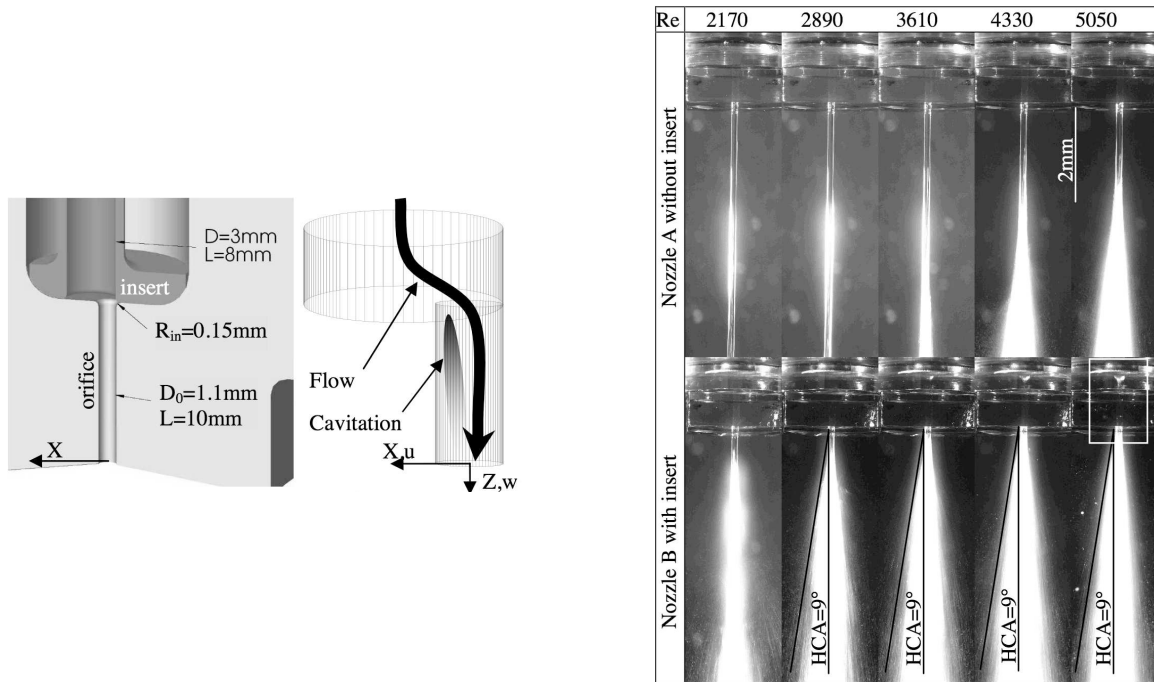


FIG. 1.3 – Influence de l'ajout d'un insert dans la buse d'injecteur, pour différents débit injectés, sur le développement du jet dans la chambre de combustion - Stahl *et al.* [13]

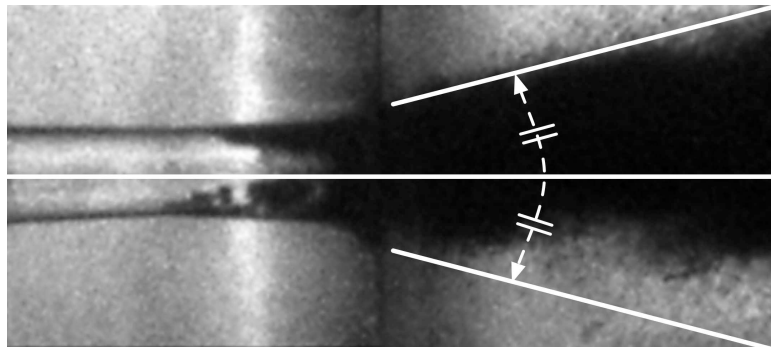


FIG. 1.4 – Visualisation du phénomène de cavitation dans un injecteur transparent - Saliba [14, 15]

d'atomisation. Ce n'est pour autant pas une condition nécessaire et suffisante. Reitz insiste sur le fait que l'atomisation est la conséquence d'une succession de plusieurs facteurs déclenchants comme le développement d'instabilités aérodynamiques, le niveau de turbulence du liquide et la forme géométrique de l'injecteur.

1.2 Une nouvelle approche : l'expérience numérique

Face aux difficultés expérimentales présentées aux paragraphes précédents, l'approche numérique semble de plus en plus utilisée pour l'analyse de ce type de physique rencontrée proche de la buse d'injecteur. Le concept très prometteur d'"expérience numérique" devient alors envisageable, en se

basant sur des simulations numériques directes.

Le concept d'“expérience numérique” consiste en des comparaisons entre des modélisations de phénomènes physiques et des simulations numériques directes (*DNS* pour *Direct Numerical Simulation*) de ces mêmes phénomènes. En l'occurrence, dans des conditions de type Diesel, les simulations numériques directes ne sont pas nombreuses, du fait des vitesses d'injection très importantes, des rapports de densités significatifs entre les phases liquide et gaz et de la résolution des équations de Navier - Stokes très complexe en diphasique. Différentes méthodes sont possibles pour la simulation des milieux diphasiques du type liquide - gaz : l'approche de type “*Volume of Fluid*” (*VOF*) [17], le suivi d'interface “*Level Set*” [18] ou la méthode des marqueurs [19]. De plus amples détails sur ces méthodes sont fournis au paragraphe 6.1.1. Récemment Zaleski [20] et Ménard [21] proposent des résultats issus de simulations numériques directes proches des conditions Diesel. L'approche de Ménard *et al.* est basée sur une méthode originale de couplage entre les approches *Volume of Fluid* et *Level Set*.

Dans les conditions simulées par Ménard, des concessions sont faites faces aux conditions d'injection haute pression de type Diesel : une vitesse d'injection diminuée à 100m/s (en lieu et place de vitesses de 300 à 400m/s habituellement observées en sortie de buse lors de pressions d'injection de l'ordre du millier de bars) et une tension de surface multipliée par un facteur trois, pour permettre de conserver les plus petites gouttes en considérant le maillage utilisé. Cependant, le choix de telles simplifications reste pertinent dans le sens où le régime de fractionnement du jet est toujours celui de l'atomisation avec de forts nombres adimensionnels de Reynolds et de Weber.

La figure 1.5 représente une évolution temporelle de l'injection, issue des calculs effectués par Ménard *et al.*. Ces résultats sont très encourageants : ils permettent d'observer la zone dense du spray. Notamment, ils permettent de visualiser dans les premiers instants de l'injection la formation d'un “champignon” en tête de spray. Ces calculs permettent aussi de mettre en évidence au niveau du dard liquide la présence d'instabilités de surface. En effet, dans l'axe d'injection, sur une distance d'environ six diamètres d'injecteur, très peu de paquets liquides se détachent du cœur. Seules des ondes de surface se distinguent : elles jouent un rôle important sur l'atomisation du jet par la suite. Les quelques paquets liquides visibles près du nez de l'injecteur n'ont pas été éjectés de la zone dense mais sont plutôt issus des tous premiers instants de l'injection, lorsque le jet pénètre dans la chambre de combustion.

Les calculs présentés par Ménard *et al.* mettent ainsi en évidence la présence d'un dard liquide intact, en sortie de buse d'injecteur. La figure 1.6 proposée par ces mêmes auteurs présente au centre ce cœur liquide intact. De plus, visuellement, il apparaît que la masse des structures liquides détachées du cœur semble être très faible comparée à celle du cœur lui-même et ce, sur une distance de plus de vingt diamètres dans l'axe d'injection.

La figure 1.7 s'intéresse plus particulièrement à la forme des paquets liquides éjectés du cœur liquide. A titre d'exemple, trois paquets extraits du calcul *DNS* sont présentés ici : le premier est une goutte sphérique ou du moins un paquet liquide dont la forme s'approche d'une sphère, le second a une forme plus complexe et le troisième ressemble à un ligament. Négliger cette diversité des formes rencontrées lors de la phase d'atomisation d'un jet liquide, en imposant une hypothèse de sphéricité

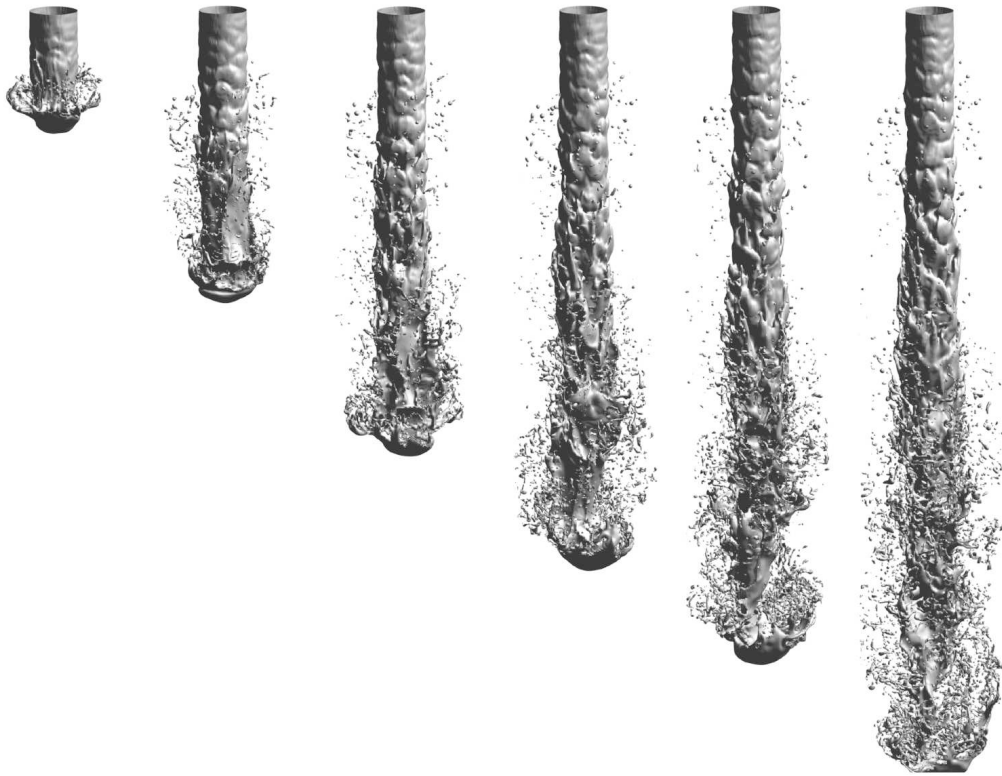


FIG. 1.5 – Dynamique de spray obtenue à l'aide d'une simulation numérique directe de Ménard *et al.* [21]

des gouttes, ne peut qu'entraîner une mauvaise estimation des transferts de quantité de mouvement (loi de traînée), de masse et d'énergie (loi d'évaporation) par la suite.

Ces observations, qu'elles soient expérimentales ou numériques, permettent ainsi de mettre en évidence plusieurs phénomènes :

- l'écoulement à l'intérieur de l'injecteur a des conséquences directes et significatives sur le processus d'atomisation et donc sur la rupture du jet liquide ; le niveau de turbulence du liquide à l'intérieur de la buse ainsi que la cavitation sont des facteurs déclenchants et il apparaît donc nécessaire de développer un modèle d'atomisation capable de prendre en compte ces phénomènes ;
- l'existence d'un dard liquide, d'une zone de liquide intact proche du nez de la buse d'injecteur, nécessite d'être prise en compte lors du développement de ce modèle ;
- les structures liquides qui se détachent du cœur ont des formes très différentes des sphères (ligaments, surfaces plissées, formes très complexes, etc.) ; il devient de plus en plus délicat de modéliser un spray comme un ensemble de gouttes sphériques isolées dans de telles conditions d'injection.

Ces considérations permettent ainsi de mettre en place un canevas pour le développement d'un modèle d'atomisation.

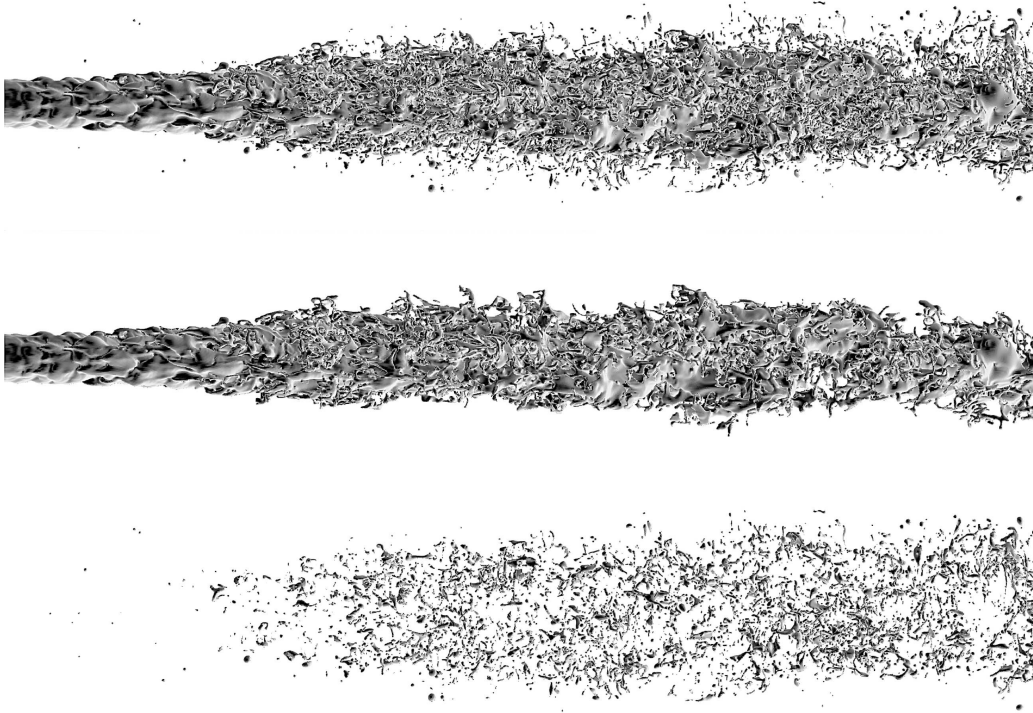


FIG. 1.6 – De haut en bas, le jet liquide complet, le cœur liquide intact et enfin la partie détachée du cœur liquide - Ménard *et al.* [21]

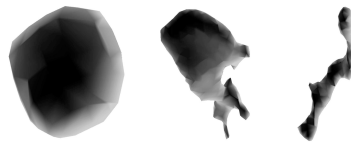


FIG. 1.7 – De gauche à droite, une goutte sphérique, un ligament et une forme plus complexe issus des calculs de Ménard *et al.* [21]

1.3 Caractérisation physique de la rupture d'un jet liquide

Avant toute description théorique de la physique du fractionnement d'un jet liquide, il est tout d'abord nécessaire d'introduire plusieurs nombres adimensionnels. En effet, ces nombres adimensionnels permettent de délimiter les différents régimes de fractionnement du jet. Une analyse linéaire des instabilités sera présentée, pour les différents régimes de fractionnement.

1.3.1 Introduction des nombres adimensionnels caractéristiques d'un jet liquide turbulent

Afin de qualifier *a priori* les différents phénomènes physiques que peut rencontrer un jet liquide turbulent comme un spray Diesel, il est donc tout d'abord nécessaire d'introduire les principales forces/énergies qu'un spray rencontre lors de son développement dans une chambre de combustion. Il y a tout d'abord la notion de force aérodynamique ou force d'inertie, ce qui revient à caractériser la quantité de mouvement du jet issue de la pression d'injection imposée dans la rampe commune en amont de l'injecteur. Face à l'aérodynamique du jet, la phase liquide possède une certaine résistance à la rupture en plusieurs paquets liquides : la force de tension de surface. Enfin, la notion de viscosité, qu'elle soit celle de la phase liquide ou de la phase gazeuse, est également importante à introduire car elle symbolise les effets de dissipation de l'énergie cinétique.

Comparer les différentes forces mises en jeu lors de l'atomisation d'un jet liquide est intéressant car cela permet de définir certains régimes de fractionnement où telle ou telle force sera prépondérante. C'est dans cette optique que sont définis les nombres adimensionnels suivants.

Le nombre de Weber We permet de quantifier le rapport entre les forces d'inertie et les forces de tension de surface :

$$We = \frac{\text{Forces d'inertie}}{\text{Forces de tension de surface}} \quad (1.1)$$

Il est possible de définir plusieurs nombres de Weber, à partir de l'expression suivante :

$$We = \frac{\rho U^2 L}{\sigma_l} \quad (1.2)$$

ρ étant une densité, U une vitesse et L une longueur, toutes les trois choisies comme étant caractéristiques du phénomène que l'on souhaite identifier. σ_l est la tension de surface de la phase liquide.

Le nombre de Weber permet par exemple de caractériser la capacité d'une goutte à résister grâce à la tension de surface aux forces aérodynamiques exercées par le gaz environnant, en le définissant de la façon suivante :

$$We_g = \frac{\rho_g (U_l - U_g)^2 D_d}{\sigma_l} \quad (1.3)$$

les indices “ l ” et “ g ” signifiant respectivement “liquide” et “gaz”. D_d est la longueur caractéristique choisie ici, à savoir le diamètre de la goutte (“ d ” pour “*droplet*”).

Il est aussi possible de définir un nombre de Weber caractérisant la résistance de la gouttes par l'effet de la tension de surface aux forces aérodynamiques mises en jeu lors de la collision de deux gouttes numérotées 1 et 2 :

$$We_l = \frac{\rho_l (U_{l,1} - U_{l,2})^2 (S_{coll})^{1/2}}{\sigma_l} \quad (1.4)$$

S_{coll} étant la surface de contact lors de la collision des deux gouttes.

Le nombre de Reynolds Re caractérise le rapport entre les forces d'inertie et les forces visqueuses, ou de façon plus qualitative, le rapport des transferts par convection et par diffusion de la quantité de mouvement.

$$Re = \frac{\text{Forces d'inertie}}{\text{Forces visqueuses}} \quad (1.5)$$

Il s'écrit de façon générale ainsi :

$$Re = \frac{UL}{\nu} \quad (1.6)$$

ν étant la viscosité dynamique caractéristique.

Il est ainsi possible de définir un nombre de Reynolds "gazeux" pour la goutte, caractérisant le ratio des forces aérodynamiques exercées par le gaz environnant la goutte et des forces de viscosité du gaz :

$$Re_g = \frac{|U_l - U_g|D_d}{\nu_g} \quad (1.7)$$

Suivant le même schéma que pour le nombre de Weber décrit plus haut, il est possible de définir un nombre de Reynolds collisionnel, quantifiant le rapport des forces d'inertie mises en jeu lors de la collision des gouttes numérotées 1 et 2 sur les forces dissipées dans les gouttes lors de la collision :

$$Re_l = \frac{|U_{l,2} - U_{l,1}|D_d}{\nu_l} \quad (1.8)$$

Le nombre d'Ohnesorge Oh est une combinaison des deux précédents.

$$Oh = \frac{\sqrt{We}}{Re} \quad (1.9)$$

Il peut ainsi être défini comme étant le rapport entre les forces de viscosité d'un côté et les forces aérodynamiques et de tension de surface de l'autre :

$$Oh = \frac{\text{Forces visqueuses liquides}}{\text{Forces d'inertie}^{\frac{1}{2}} \text{ Forces de tension de surface}^{\frac{1}{2}}} \quad (1.10)$$

Il est utilisé pour introduire l'effet de la viscosité du liquide dans le processus de déstabilisation d'une goutte, par glissement dans le gaz ou lors de collisions entre gouttes.

Ces nombres adimensionnels étant définis, ils vont permettre de classer les différents régimes de fractionnement d'un jet liquide, tels qu'ils sont observés expérimentalement.

1.3.2 Introduction aux différents régimes de fractionnement d'un jet liquide

Avant toute description des différents régimes de fractionnement, il est nécessaire de définir deux longueurs caractéristiques du jet liquide :

- la longueur de surface intacte L_1 , qui est la distance suivant l'axe d'injection entre les lèvres de l'injecteur et les premiers paquets liquides détachés du cœur liquide ;
- la longueur de cœur liquide L_2 , qui est la distance suivant l'axe d'injection entre les lèvres de l'injecteur et la fin du dard liquide intact.

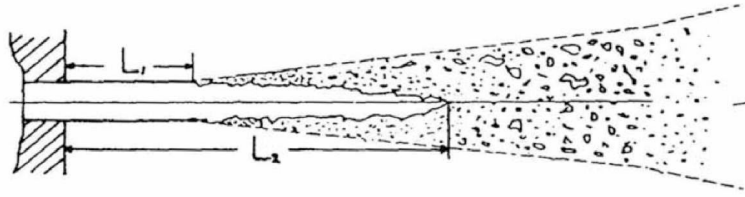


FIG. 1.8 – Définition de deux longueurs caractéristiques du jet : la longueur de surface intacte L_1 et la longueur de cœur liquide L_2 [22]

La figure 1.8 permet de mieux visualiser comment sont définies ces deux longueurs caractéristiques.

D'autres grandeurs sont classiquement utilisées lors de la caractérisation d'un spray vaporisant dans une chambre de combustion :

- la pénétration liquide du spray dans la chambre, qui est la distance, dans l'axe d'injection, entre le nez de l'injecteur et le front liquide ; pour les sprays haute pression, ce front liquide est difficilement identifiable et la communauté motoriste définit souvent le front liquide comme étant la zone où le cumul en masse de liquide, depuis le nez de l'injecteur, atteint 95% de la masse totale du spray dans la chambre ;
- la pénétration vapeur, qui peut être définie de la même façon, en considérant cette fois la quantité de carburant vaporisé ; le critère généralement utilisé diffère cependant : le front de vapeur est défini comme étant le point le plus éloigné du nez de l'injecteur où la fraction massique de vapeur est supérieur à $Y_{v,min}$ (de l'ordre de 1.10^{-3}) ;
- l'angle du spray θ , qui correspond à l'angle du plus petit cône contenant tous les fragments liquides représentatifs du spray considéré ; là encore, un critère est nécessaire et peut être choisi comme équivalent à celui pour la pénétration vapeur, en considérant cette fois une fraction massique de liquide $Y_{l,min}$.

D'après Reitz [23], le régime de fractionnement d'un jet liquide issu d'un trou sphérique dans une atmosphère gazeuse au repos dépend de la vitesse d'injection u_0 . Tout d'abord, une très faible vitesse conduit à un écoulement au goutte à goutte, et ce, dès la sortie de l'injecteur (la fameuse "expérience du robinet"). Ensuite, lorsque la vitesse d'injection augmente, Reitz [23] différencie quatre régimes de fractionnement (cf figure 1.9 pour les différents points référencés sur la courbe dite de "stabilité").

Le régime de Rayleigh : pour de faibles vitesses d'injection, la longueur de surface intacte croît linéairement avec la vitesse (segment [CD]). Rayleigh a montré qu'en présence de ce régime de fractionnement, le temps de rupture du jet est indépendant de la vitesse d'injection. Les forces de capillarité provoquent la croissance des perturbations à la surface du jet liquide, comme l'illustre le schéma encadré en rouge, à droite de la figure 1.9. La longueur d'onde de cette instabilité est supérieure au diamètre du jet liquide. La rupture se produit donc à une grande distance de l'injecteur et donne naissance à des gouttes dont le diamètre peut être supérieur au diamètre du trou d'injecteur.

Le premier régime induit par l'aérodynamique (ou *First Wind-Induced Breakup*) : si la vitesse d'injection est plus importante, la longueur de surface intacte atteint un maximum puis décroît rapidement (segment [EF]). Weber attribue cette transition à la présence d'une instabilité de cisaillement de type Kelvin - Helmholtz provoquée par des forces aérodynamiques, qui étaient négligeables en régime de *Rayleigh*. Leroux [24] émet cependant une nuance à ce sujet et indique que cet effet n'est visible qu'en présence de rapports de densités liquide/gaz importants. Les gouttes qui sont formées dans cette plage de vitesses d'injection ont un rayon moins régulier mais plus petit que pour le régime de *Rayleigh*.

Le second régime induit par l'aérodynamique (ou *Second Wind-Induced Breakup*) : pour des vitesses d'injection encore plus importantes, la longueur de surface intacte reprend une tendance à augmenter (segment [FG] ou [FH]). Ce revirement de situation est souvent attribué au rôle désormais prépondérant de la vitesse relative liquide/gaz. A cela s'ajoute une augmentation de la turbulence dans le jet, liée à une vitesse d'injection accrue. Dans ce type de jets, la surface du cœur liquide y est très instable et irrégulière, et l'arrachement des gouttes commence très proche du nez de l'injecteur.

Le régime d'*Atomisation* : la transition entre le second régime induit par l'aérodynamique et le régime d'atomisation n'est pas évidente à déterminer. Ce régime concerne le segment [FG] sur la figure 1.9 mais aussi au delà, pour des vitesses d'injection encore supérieures. Le cœur liquide voit désormais des instabilités se développer dès la sortie de l'injecteur, la longueur de surface intacte diminue donc et les premières gouttes sont arrachées près des lèvres de la buse.

L'étude qui va suivre s'inscrit dans ce type de fractionnement de jets liquides ; en effet, les sprays haute pression de type Diesel, avec leur vitesse d'injection très importante, appartiennent au régime d'atomisation.

Afin de se représenter les différentes topologies d'écoulements, selon le régime de fractionnement du jet, Faeth [25] propose les quatre schémas présentés à droite de la figure 1.9 ainsi qu'un graphique à gauche de la figure 1.10 classant les différents régimes de fractionnement en fonction du nombre de Weber gazeux We_g et du nombre d'Ohnesorge Oh . Reitz [23] propose lui aussi un type de classification (à droite de la figure 1.10), en remplaçant le nombre de Weber gazeux par le nombre de Reynolds liquide Re_l et en y insérant le rapport des densités du gaz ρ_g et du liquide ρ_l .

Reitz, durant sa thèse [23], a vérifié chacun des phénomènes potentiellement déclencheurs de l'atomisation d'un jet : la géométrie de l'injecteur, le niveau de turbulence du liquide, les profils de vitesse ainsi que leur relaxation en sortie d'injecteur. D'après cette étude, aucun de ces phénomènes n'est le seul responsable du régime d'atomisation. L'unique mécanisme qui pourrait conduire seul à l'atomisation du jet serait la cavitation au sein de l'injecteur. Mais d'après Reitz toujours, ce serait plutôt la combinaison de plusieurs phénomènes comme ceux énumérés ici qui serait responsable du phénomène d'atomisation. Si l'on observait des changements radicaux en terme de topologie d'écoulement entre le second régime induit par l'aérodynamique et le régime d'atomisation, la cavitation pourrait être considérée comme seule responsable du phénomène d'atomisation. Or, ces deux régimes de fraction-

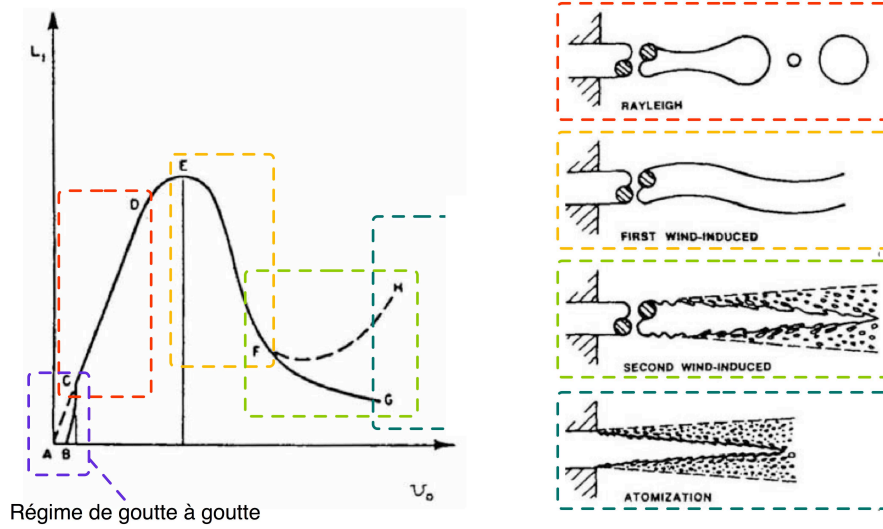


FIG. 1.9 – Courbe de stabilité - évolution de la longueur de surface intacte L_1 en fonction de la vitesse d'injection u_0

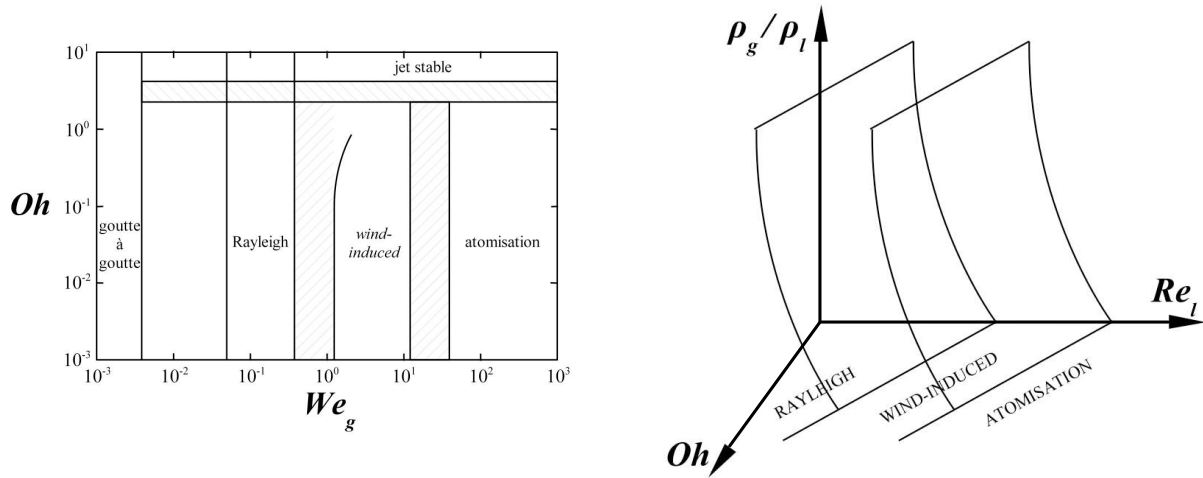


FIG. 1.10 – À gauche, les régimes de fractionnement en fonction de We_g et Oh selon Faeth [25] - à droite, les limites qualitatives proposées par Reitz [23] en fonction de Re_l , Oh et ρ_g/ρ_l

nement ne sont pas fondamentalement différents. Reitz conclue ainsi que ces deux régimes peuvent être étudiés de la même façon et que donc, les instabilités aérodynamiques seraient responsables du fractionnement du jet pour ces deux régimes.

La cavitation, les vitesses d'injections ainsi que le niveau de turbulence dans la phase liquide, différents dans les deux cas pourraient expliquer la nécessité de modifier les constantes de modélisation issue de la théorie des instabilités aérodynamiques. En effet, la théorie linéaire des instabilités, présentée au paragraphe suivant, ne prend pas en compte les caractéristiques de l'écoulement à la sortie de l'injecteur.

1.3.3 Théorie linéaire des instabilités appliquée au fractionnement d'un jet liquide

Cette analyse s'appuie sur les travaux initialement présentés par Rayleigh [26], Plateau [27], Weber [28] et plus récemment par Levich [29] et Reitz [16].

Considérons donc un cylindre liquide axisymétrique de longueur infinie et de rayon a , injecté selon un profil de vitesse $U(r)$ dans un milieu gazeux non visqueux, incompressible et au repos. Les transferts de masse et d'énergie entre les deux phases seront négligés par la suite. Les composantes normale et tangentielle des contraintes considérées par la suite seront supposées continues.

L'hypothèse de départ consiste à considérer un déplacement infinitésimal de l'interface liquide/gaz de la forme :

$$\eta = \eta_0 e^{ikz + \omega t} \quad (1.11)$$

avec η_0 l'amplitude de la perturbation initiale, $k = 2\pi/\lambda$ le nombre d'onde et λ la longueur d'onde, z la distance axiale de l'injecteur et t le temps. ω est un nombre complexe tel que $\omega = \omega_r + i\omega_i$, la partie réelle ω_r étant le taux d'accroissement, la partie imaginaire pur ω_i donnant la vitesse de propagation c de la perturbation, grâce à la relation suivante :

$$c = -\frac{\omega_i}{k} \quad (1.12)$$

Le déplacement η engendre des perturbations de pression p_i et de vitesse $\vec{u}$ (u_i, v_i), l'indice i se référant soit au liquide soit au gaz.

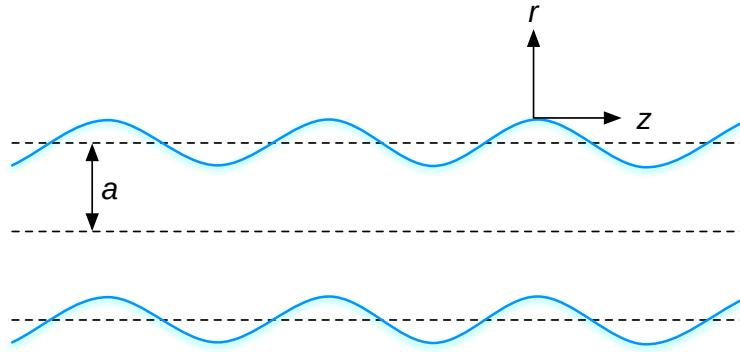


FIG. 1.11 – Représentation schématique du système étudié pour la théorie linéaire des instabilités liquide/gaz

Les équations de conservation de masse et de quantité de mouvement pour la phase i , dans le système de coordonnées cylindriques, une fois linéarisées sont :

$$\frac{\partial u_i}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial r v_i}{\partial r} = 0 \quad (1.13)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + U_i(r) \frac{\partial u_i}{\partial z} + v_i \frac{\partial U_i(r)}{\partial r} = -\frac{1}{\rho_i} \frac{\partial p_i}{\partial z} + v_i \left(\frac{\partial^2 u_i}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u_i}{\partial r} \right) \right) \quad (1.14)$$

$$\frac{\partial v_i}{\partial t} + U_i(r) \frac{\partial v_i}{\partial z} + v_i \frac{\partial U_i(r)}{\partial r} = -\frac{1}{\rho_i} \frac{\partial p_i}{\partial r} + v_i \left(\frac{\partial^2 v_i}{\partial z^2} + \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial r v_i}{\partial r} \right) \right) \quad (1.15)$$

Les conditions limites à l'interface, au premier ordre, sont introduites. Les conditions cinématiques sont données par la relation 1.16 :

$$v_i = \frac{\partial \eta}{\partial t} + U_i(r) \frac{\partial \eta}{\partial z} \quad (1.16)$$

Les conditions sur les contraintes tangentielles sont exprimées comme suit :

$$\frac{\partial u_l}{\partial r} = - \frac{\partial v_l}{\partial z} \quad (1.17)$$

En ce qui concerne les contraintes normales, la relation suivante est utilisée, avec σ_l la tension de surface du liquide :

$$-p_l + 2\mu_l \frac{\partial v_l}{\partial r} - \frac{\sigma_l}{a^2} \left(\eta + a^2 \frac{\partial^2 \eta}{\partial z^2} \right) + p_g = 0 \quad (1.18)$$

La résolution du système des trois équations 1.13, 1.14 et 1.15 nécessite l'introduction d'un potentiel de vitesse ϕ_l ainsi que deux fonctions de courant ψ_i (une pour chaque phase) :

$$\phi_l = \Phi_l(r) e^{ikz + \omega t} \quad (1.19)$$

$$\psi_l = \Psi_l(r) e^{ikz + \omega t} \quad (1.20)$$

$$\psi_g = \left(U_g(r) - i \frac{\omega}{k} \right) \eta f(r) \quad (1.21)$$

avec $f(r)$ une fonction du rayon. Il vient ainsi l'équation de dispersion suivante :

$$\begin{aligned} \omega^2 &+ \frac{2\nu_l k^2 \omega}{I_0(ka)} \left(I_1'(ka) - \frac{2kl}{k^2 + l^2} \frac{I_1'(la)}{I_1(la)} I_1(ka) \right) \\ &= \frac{\sigma_l k}{a^2 \rho_l} (1 - a^2 k^2) \frac{l^2 - k^2}{l^2 + k^2} \frac{I_1(ka)}{I_0(ka)} + \frac{\rho_g}{\rho_l} \left(U_l(r) - \frac{i\omega}{k} \right)^2 k^2 \frac{l^2 - k^2}{l^2 + k^2} \frac{I_1(ka)}{I_0(ka)} \frac{K_0(ka)}{K_1(ka)} \end{aligned} \quad (1.22)$$

où les I_n sont des fonctions de Bessel modifiées de première espèce et d'ordre n et les K_n des fonctions de Bessel modifiées de seconde espèce, elles aussi d'ordre n . l est défini par la relation suivante :

$$l = \sqrt{k^2 + \frac{\omega}{\nu_l}} \quad (1.23)$$

L'étude de cette équation de dispersion, dans certaines conditions asymptotiques, permet de mettre en évidence l'existence de différents modes de rupture.

Le régime de *Rayleigh* : correspond à un jet liquide à faible vitesse u_l évoluant dans un environnement gazeux à faible densité ρ_g comparée à celle du liquide ρ_l . De plus, le liquide est supposé non visqueux. Dans de telles conditions, l'équation de dispersion 1.22 se simplifie en :

$$\omega^2 = \frac{\sigma_l k}{a^2 \rho_l} (1 - a^2 k^2) \frac{I_1(ka)}{I_0(ka)} \quad (1.24)$$

L'équation 1.24 a été initialement proposée par Rayleigh [30]. Elle a été obtenue à l'époque suite à un bilan énergétique. De cette équation de dispersion, il est possible de différencier trois cas limites :

- si $ka > 1$ alors ω est un imaginaire pur et il y a simple propagation de l'onde à une vitesse $c = i\omega/k$;

- si $ka = 1$ alors $\eta = \eta_0$, il n'y a ainsi aucune évolution de la perturbation ;
- si $ka < 1$ alors ω est un réel positif ω_r ($I_0(x)$ et $I_1(x)$ sont des fonctions positives pour des x compris entre 0 et 1) ; l'onde ne se propage pas et la surface du liquide est instable : toute perturbation dont la longueur d'onde $\lambda = 2\pi/k$ est supérieure à la circonférence du jet voit son amplitude augmenter ; c'est un effet direct de la tension de surface σ_l .

La fonction $\omega_r = f(ka)$ permet de déterminer une longueur d'onde λ_{max} où ω_r est maximum telle que :

$$\lambda_{max} = \frac{2\pi}{k_{max}} \approx 9.02a \quad (1.25)$$

L'ordre de grandeur donné par la relation 1.25 permet, en utilisant l'équation de dispersion 1.24, d'estimer un taux d'accroissement maximal $\omega_{r,max}$:

$$\omega_{r,max} \approx 0.34 \quad (1.26)$$

L'onde, dont le taux d'accroissement est maximal, est supposée être responsable de la rupture du jet. Cette dernière doit avoir lieu lorsque l'amplitude de la perturbation atteint la valeur du rayon a . Cela permet ainsi d'introduire le temps de rupture t_{bu} ("bu" pour *breakup*) :

$$\eta = a = \eta_0 e^{\omega_{r,max} t_{bu}} \quad (1.27)$$

De plus, en supposant qu'une goutte de rayon r est éjectée lorsque l'onde la plus instable atteint une amplitude a , la conservation de la masse impose que :

$$r = \left(\frac{3a^2 \lambda_{max}}{4} \right)^{1/3} \approx 1.89a \quad (1.28)$$

On retrouve donc ainsi cette observation expérimentale, à savoir des gouttes générées lors du régime de Rayleigh plus grosses que le diamètre du jet.

Le régime de *First Wind-Induced Breakup* : dans ce régime, le second terme du membre de droite de l'équation 1.22 ne peut plus être considéré comme négligeable. Weber [28] propose une équation de dispersion simplifiée de la forme suivante :

$$\omega^2 + 3\nu_l k^2 \omega = \frac{\sigma_l}{2\rho_l a^3} (1 - k^2 a^2) k^2 a^2 + \frac{\rho_g}{\rho_l} \frac{u_l^2 k^3 a^3}{2a^2} \frac{K_0(ka)}{K_1(ka)} \quad (1.29)$$

Le gaz ambiant amplifiant le taux d'accroissement des perturbations (cf second terme du membre de droite de l'équation 1.29), la rupture du jet est plus rapide, mais le rayon des gouttes formées reste encore de l'ordre du diamètre du jet. Par ailleurs, les grandes longueurs d'onde du type $ka \ll 1$ sont telles que les forces de tension de surface favorisent toujours le fractionnement du jet (cf premier terme du membre de droite de l'équation 1.29).

Le régime de *Second Wind-Induced Breakup* : la vitesse d'injection étant encore plus importante que dans le cas précédent, les longueurs d'onde impliquées sont de plus en plus faibles. Toujours en négligeant les effets de viscosité du liquide, l'équation 1.22 se transforme en :

$$\omega^2 = \frac{\rho_g u_l^2 k^2 - \sigma_l k^3}{\rho_l} \quad (1.30)$$

Le taux d'accroissement ω est un réel pur ω_r lorsque $\rho_g u_l^2 k^2 > \sigma_l k^3$. L'amplitude des ondes est donc augmentée ici par le mouvement relatif liquide/gaz, alors que, contrairement aux précédents régimes de fractionnement, les forces de tension de surface s'opposent ici à la rupture du jet.

Le régime d'Atomisation : ici, la taille des gouttes formées est très inférieure au rayon de l'injecteur. Les longueurs d'onde étudiées ici sont donc du type " $ka \gg 1$ ". En ne considérant que cette gamme de longueurs d'onde et en remplaçant les fonctions de Bessel par leur valeur asymptotique respective, l'équation de dispersion initialement de la forme 1.22 se transforme en :

$$(\omega^2 + 2\nu_t k^2)^2 + \frac{\sigma_l k^3}{\rho_l} - 4\nu_l k^3 \left(k^2 + \frac{\omega}{\nu_l} \right)^{1/2} + (\omega + i\nu_l k)^2 \frac{\rho_g}{\rho_l} = 0 \quad (1.31)$$

Il apparaît ici que le taux de croissance des ondes ω ne dépend plus du diamètre initial du jet mais principalement de la viscosité du liquide, des masses volumiques des deux phases liquide et gaz ainsi que de la vitesse du jet liquide.

Toutefois, il faut garder en tête les limitations quant à la l'utilisation d'une approche linéaire pour étudier un tel régime de fractionnement, en considérant les profils de vitesse de l'écoulement et le fait de linéariser les équations de conservation.

Par la suite, le seul régime de fractionnement considéré sera ce dernier car les sprays haute pression de type Diesel rentrent dans cette catégorie.

1.3.4 Conclusions sur l'analyse linéaire des instabilités

L'étude des instabilités à l'interface liquide/gaz est primordiale pour mettre en évidence la phénoménologie de l'écoulement, en fonction des différentes conditions d'injection. Elle permet de différencier quatre régimes de fractionnement d'un jet liquide. Pour chacun de ces régimes, l'analyse de l'équation de dispersion met en avant l'effet de chacune des forces mises en jeu dans le fractionnement du jet liquide. Cette étude, appliquée au cas de l'atomisation haute pression de type Diesel, permettra de construire un modèle d'atomisation primaire.

En revanche, Marmottant [32] fait remarquer que le développement des ondes de surface est principalement piloté par le profil initial de la couche de vorticit  entre le liquide et le gaz. Comme le stipule d  j  Reitz [10], il est important de conna  tre *a priori* la topologie de l' coulement dans l'injecteur pour pr  dire de fa  on pr  cise le d  veloppement d'instabilit  s. L'influence de la g  om  trie    l'int  rieur m  me de l'injecteur doit   tre prise en compte dans la mod  lisation de la rupture du jet en aval de l' coulement, comme le proposent McCarthy et Molloy [31] (figure 1.12).

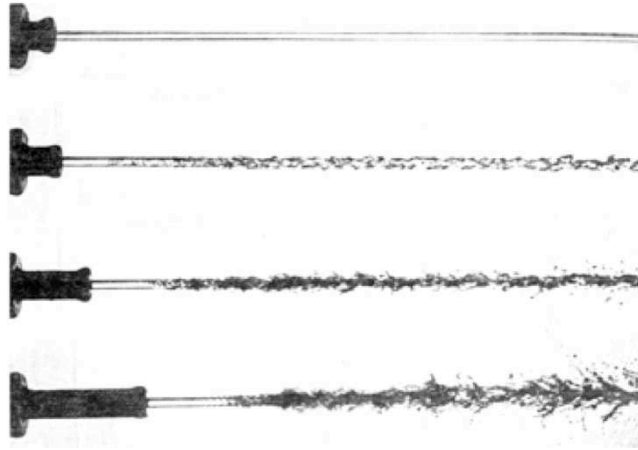


FIG. 1.12 – Influence du rapport L_{inj}/D_{inj} de l'injecteur (longueur du tube L_{inj} - diamètre du tube D_{inj}) sur la rupture d'un jet de glycérol/eau dans de l'air - étude proposée par McCarthy et Molloy [31] en 1974 - de haut en bas : $L/D = 0, 1, 5$ et 10 - $u_{inj} = 20m/s$, $We_g = 15$, $D_{inj} = 0.00254m$

Chapitre 2

Revue des modèles d'atomisation actuels

2.1 Les différentes approches possibles

Les modèles d'atomisation des jets liquides implantés dans les codes industriels actuels, notamment *AVL Fire* qui est le code utilisé durant cette étude, sont essentiellement basés sur une formulation lagrangienne. Cependant, cette formulation ne correspond qu'à l'une des méthodes possibles dédiées au problème général de la résolution de l'équation d'évolution statistique d'un spray constitué de particules sphériques. Ce problème a été posé mathématiquement, notamment par l'équation de *Williams* [33]. Pour résoudre ce problème, l'approche basée sur une formulation eulérienne mono ou multi-fluide(s) est également possible. Cette formulation eulérienne reste cependant peu utilisée en ce qui concerne la modélisation de l'atomisation.

2.1.1 L'équation de Williams

En considérant la fonction de distribution $f(\vec{x}, t, m, \vec{u}, T) d\vec{x} dm d\vec{u} dT$, il est possible de caractériser d'un point de vue statistique le comportement d'un spray. En effet, cette fonction de distribution correspond à la probabilité de présence de gouttes dans un volume de référence $d\vec{x}$ centré autour de $\vec{x}$, à l'instant t , ayant une vitesse comprise dans l'intervalle $[\vec{u}, \vec{u} + d\vec{u}]$, une température comprise dans l'intervalle $[T, T + dT]$ et une masse comprise dans l'intervalle $[m, m + dm]$. L'intégrale de la fonction f peut donc être interprétée comme le nombre de gouttes par unité de volume.

L'équation d'évolution de cette fonction de distribution f a été proposée par Williams en 1958 [33]. Elle prend en compte les phénomènes de croissance/décroissance de la taille des gouttes, les éventuelles collisions et coalescences entre gouttes, la rupture secondaire et la création de gouttes issues de la rupture, l'évaporation des gouttes dans une atmosphère plus chaude et les effets des forces aérodynamiques. L'équation d'évolution selon Williams s'écrit ainsi :

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial \dot{\vec{x}} f}{\partial \vec{x}} - \frac{\partial \dot{m} f}{\partial m} - \frac{\partial \dot{\vec{u}} f}{\partial \vec{u}} - \frac{\partial \dot{T} f}{\partial T} + Q + \Gamma \quad (2.1)$$

avec $\vec{\dot{x}} = \vec{u}$ la vitesse des particules considérées, $\dot{m}$ le taux de variation de la masse des particules (évaporation), $\vec{\dot{u}}$ l'accélération/décélération des particules due à la loi de traînée et $\dot{T}$ le réchauffement/refroidissement des particules. Dans cette approche, les particules sont considérées comme sphériques et sont caractérisées par leur masse m . Q et Γ sont des termes supplémentaires qui permettent la prise en compte de la création de gouttes par la rupture secondaire et les collisions entre gouttes.

Chaque terme énuméré précédemment doit être fermé en fonction des propriétés des particules et des lois d'évolution relatives aux phénomènes physiques. Par exemple, la loi du “ D^2 ”, initialement proposée par Spalding [34, 35], peut être utilisée pour évaluer le taux de vaporisation $\dot{m}$. Dans le cas d'un spray turbulent constitué d'un grand nombre de gouttes, les dérivées temporelles $\vec{\dot{x}}$, $\dot{m}$, $\vec{\dot{u}}$ et $\dot{T}$ sont des moyennes conditionnées dans l'espace des phases :

$$\vec{\dot{u}} = \left\langle \vec{\dot{u}}(\vec{x}, t, \vec{u}, m, T, X_g) \right\rangle |_{\vec{x}, \vec{u}, m, T} \quad (2.2)$$

X_g représentant les variables relatives au gaz environnant les gouttes concernées et la notation $\langle \rangle |$ représentant la notion de moyenne d'ensemble conditionnée. La fermeture de ce type d'équations se fait donc à deux niveaux. Le premier consiste à intégrer une loi d'évolution pour les gouttes et le second à modéliser l'effet de la moyenne conditionnée. Cette deuxième étape est importante et peut s'avérer problématique. Par exemple, dans l'expression de la loi de traînée, il apparait la vitesse du gaz environnant, conditionnée par la présence des gouttes. Cette vitesse du gaz vue par les gouttes doit dans ce cas être déterminée [36].

2.1.2 L'approche lagrangienne

L'approche lagrangienne est l'une des méthodes les plus utilisées pour la résolution de l'équation de Williams. En effet, c'est cette approche qui est généralement choisie pour l'implémentation dans des logiciels de *CFD* (*Computational Fluid Dynamics*).

L'équation de Williams est à plusieurs dimensions : trois pour l'espace, trois pour la vitesse, une pour le temps, une pour la température et une pour la masse. Ce qui fait un total de neuf dimensions. Les méthodes de résolution directe du type “différences finies” ne sont pas applicables dans de telles conditions. En effet, en considérant n discrétisations, la taille d'un calcul de ce type serait de l'ordre de n^9 .

L'approche lagrangienne stochastique, de type Monte - Carlo est assimilée aux méthodes statistiques. Elle consiste à résoudre le transport d'un grand nombre d'échantillons stochastiques de la fonction de distribution considérée. Chaque terme source de l'équation de Williams est alors modélisé pour s'intégrer au transport de chacun de ces échantillons stochastiques. C'est un avantage non négligeable pour le calcul des moyennes non conditionnées. De plus, comparée aux méthodes de type “différences finies”, l'approche lagrangienne permet des calculs dont la taille est linéaire avec le nombre de dimensions de l'équation de Williams : $9n$. Il existe cependant un inconvénient à utiliser une telle approche. Pour des méthodes numériques du type “différences finies”, la distance entre les nœuds est choisie de

telle sorte que $\Delta x^{ordre} = 1/n^{ordre}$. En ce qui concerne l'approche lagrangienne, elle a une convergence statistique en $1/\sqrt{n_p}$, n_p étant le nombre de particules par cellule. Cette méthode peut donc être considérée comme faiblement convergente car similaire à un schéma d'ordre 1/2 pour une méthode du type "différences finies".

2.1.3 L'approche eulérienne

Une autre approche pour la résolution de l'équation de Williams (équation 2.1) consiste en une formulation eulérienne. En effet, en se basant sur le transport de certains moments de la fonction de distribution $f(\vec{x}, t, m, \vec{u}, T)$, il est possible en intégrant l'équation de Williams d'obtenir une équation de transport pour la fraction massique de liquide par exemple, caractérisant la dispersion du spray liquide dans la chambre de combustion. Cependant, la difficulté réside ici dans l'expression des termes intégraux en fonction des moments résolus et des variables de la phase gaz.

La méthode globale consiste à considérer la fonction de distribution $f(\vec{x}, t, m, \vec{u}, T)$ dans l'intégralité du domaine de variation des variables de phase m , $\vec{u}$ et T . Un certain nombre de grandeurs peuvent être définies à partir de cette fonction de distribution.

Le nombre de gouttes par unité de volume N_l :

$$N_l(x, t) = \int_m \int_{\vec{u}} \int_T f(\vec{x}, t, m, \vec{u}, T) dm d\vec{u} dT \quad (2.3)$$

La fraction volumique moyenne de liquide $\bar{Y}_l$:

$$\bar{Y}_l(x, t) = \int_m \int_{\vec{u}} \int_T V_l f(\vec{x}, t, m, \vec{u}, T) dm d\vec{u} dT \quad (2.4)$$

V_l étant le volume d'une goutte liquide.

La fraction massique moyenne de liquide $\tilde{Y}_l$:

$$\bar{\rho} \tilde{Y}_l(x, t) = \int_m \int_{\vec{u}} \int_T \rho_l V_l f(\vec{x}, t, m, \vec{u}, T) dm d\vec{u} dT \quad (2.5)$$

Plus généralement, il est possible de définir une variable $\bar{\Phi}|_l$ conditionnée par le liquide :

$$\bar{Y}_l \bar{\Phi}|_l(x, t) = \int_m \int_{\vec{u}} \int_T V_l \Phi f(\vec{x}, t, m, \vec{u}, T) dm d\vec{u} dT \quad (2.6)$$

On a de plus :

$$\bar{\Phi} = \bar{Y}_l \bar{\Phi}|_l + (1 - \bar{Y}_l) \bar{\Phi}|_g \quad (2.7)$$

Avec les relations 2.6 et 2.7, il est tout à fait possible de poser $\bar{u}|_l = \bar{\Phi}|_l(x, t)$ et ainsi obtenir une équation de transport pour la vitesse de la phase liquide, comme le propose par exemple Simonin [36]. Cette approche dite "*Eulerian Multiphase Flows*" permet de modéliser un jet liquide de la façon suivante : un jeu d'équations de transport est obtenu pour la phase liquide en assimilant cette dernière à un ensemble de gouttes discrètes, un second pour la phase gaz. Les termes de transfert entre les deux phases nécessitent généralement l'introduction d'un diamètre, pour utiliser des lois de comportement

individuel de type “goutte” (loi de traînée, transfert de masse et de chaleur...) ou, de façon plus générale, une quantité d’interface liquide/gaz. Pour l’atomisation, il faut décrire l’évolution de la surface d’échange liquide/gaz. Dans le cadre de méthodes “multiphase flows” eulériennes, différentes approches existent. Wan et Peters [37] proposent une équation de transport pour le carré du diamètre D^2 des gouttes liquides, alors que Simonin et Soulas [38] d’un côté, Iyer et Abraham [39, 40, 41] de l’autre, proposent une équation de transport pour la quantité d’interface liquide/gaz. Cet aspect de la modélisation sera abordé plus en détails au chapitre 4.

La méthode sectionnelle diffère de celle précédemment décrite dans la mesure où, cette fois-ci, l’intégration de la fonction de distribution $f(\vec{x}, t, m, \vec{u}, T)$ ne se fait pas sur l’ensemble des particules mais seulement sur une “section” ou classe de particules. En considérant par exemple une section de particules dont la masse est comprise dans l’intervalle $[m_k, m_{k+1}]$, toute grandeur volumique $\bar{\Phi}|_{l,k}(x, t)$ peut-être définie de la façon suivante :

$$\bar{Y}_{l,k} \bar{\Phi}|_{l,k}(x, t) = \int_{m_k}^{m_{k+1}} \int_{\vec{u}} \int_T V_{l,k} \Phi_k f(\vec{x}, t, m, \vec{u}, T) dm d\vec{u} dT \quad (2.8)$$

En posant $\bar{u}|_{l,k} = \bar{\Phi}|_{l,k}(x, t)$, une équation de transport pour la vitesse conditionnée à la section $m \in [m_k, m_{k+1}]$ est obtenue. C’est l’approche choisie par Tambour *et al.* [42, 43] puis par Laurent et Massot [44, 45] et enfin Divis [46, 47]. Elle se caractérise par autant de jeux d’équations de transport que de sections considérées. Plus le nombre de classes représentées est important, plus la fonction de distribution sera précise (taille des particules, vitesses conditionnées sur la section, etc.).

Comparé à l’approche globale, il existe une difficulté supplémentaire. En effet, les variations de diamètre des gouttes (évaporation, collisions ou coalescences entre gouttes, rupture secondaire) impliquent l’introduction dans les équations de transport de termes de transfert entre sections.

2.1.4 Autres méthodes de résolution

La méthode de Monte - Carlo est également possible avec un formalisme eulérien. Cela consiste à considérer n champs eulériens stochastiques. Les résultats obtenus à l’aide d’un tel formalisme sont une fonction de densité de probabilité de vitesses conditionnées et de fractions massiques (Soulard et Sabel’nikov [48]).

Les méthodes eulériennes de type “multiphase flows” sont en général utilisées lorsque l’espace des phases est réduit (particules de même taille, de même température). Le problème se retrouve ainsi réduit à une seule vitesse moyenne des particules. Beck et Watkins [49, 50, 51, 52] propose une amélioration en présumant la forme des fonctions de densité de probabilité à partir de la moyenne conditionnée par les particules et sa variance. Dans leurs études, une *PDF* de type Rosin - Rammmler est proposée car sa formulation nécessite l’introduction de ces deux moments pour générer une famille de fonction de densité de probabilité.

Marchisio et Fox [53, 54, 55, 56, 57, 58] proposent quant à eux un modèle appelé *Direct Quadrature Method of Moments* ou “*DQMOM*” qui est une généralisation du transport à n moments de la fonction de densité de probabilité.

Les méthodes eulériennes et lagrangiennes présentées ici supposent toujours des particules isolées et sphériques. Cette hypothèse de sphéricité peut s’avérer limitante en zone proche de l’injecteur, là où le spray est plutôt un milieu continu liquide (dard liquide). Pourouchottamane *et al.* [59] se sont intéressées à la modélisation du comportement de gouttes non sphériques. Cependant, les interactions particule/particule ou particules/gaz dans de telles conditions restent très difficiles à appréhender, quelque soit la forme des gouttes envisagée.

2.2 Les lois de comportement individuel de type “goutte”

2.2.1 Transfert de quantité de mouvement et positionnement des gouttes

L’équation de conservation de la quantité de mouvement s’écrit :

$$\sum_i F_i = m_d a_{d,i} = m_d \frac{du_{d,i}}{dt} \quad (2.9)$$

et la position de la goutte est déterminée par la relation suivante :

$$u_{d,i} = \frac{dx_{d,i}}{dt} \quad (2.10)$$

avec F_i une force extérieure appliquée à la goutte, m_d sa masse, $x_{d,i}$ ses coordonnées, $u_{d,i}$ ses composantes de vitesse et $a_{d,i}$ ses composantes d’accélération. Les forces extérieures concernées ici sont les forces de traînée, de masse ajoutée, de portance, de gravité. Cependant, dans le cas du transport de gouttes lourdes à haute vitesse, la force de traînée est supposée prépondérante par rapport aux autres forces extérieures.

2.2.1.1 Loi de traînée

La force de traînée de composante $F_{D,i}$ (“ D ” pour “*drag*”) peut être considérée comme la force de résistance exercée par le gaz sur la goutte pour la freiner. Selon la loi communément utilisée de Schiller-Naumann [60], elle fait intervenir la notion de section efficace S_{eff} de la goutte ainsi qu’un coefficient de traînée C_D .

$$F_{D,i} = \frac{1}{2} \rho_l C_D S_{eff} (u_{l,i} - u_{g,i})^2 \quad (2.11)$$

avec respectivement $u_{l,i}$ et $u_{g,i}$ les composantes de vitesse instantanée du liquide et du gaz. Le coefficient de traînée C_D s’exprime à partir de la corrélation suivante, obtenue expérimentalement depuis la loi de Stokes :

$$C_D = \begin{cases} 0.44 & \text{si } Re_l \geq 1000 \\ \frac{24}{Re_l} (1 + 0.15 Re_l^{0.687}) & \text{si } Re_l \leq 1000 \end{cases} \quad (2.12)$$

avec Re_l le nombre adimensionnel de Reynolds, défini pour la goutte considérée, à partir d’une vitesse relative liquide/gaz. Dans l’expression de la force de traînée, la vitesse instantanée du gaz intervient. Or, en formulation *RANS* (pour *Reynolds Averaged Navier - Stokes*), seule la vitesse moyenne du gaz est disponible. Il est donc nécessaire d’utiliser un modèle pour la vitesse du gaz vue par la goutte et qui constitue en cas de turbulence le modèle de dispersion turbulente.

2.2.1.2 Dispersion turbulente

Afin de prendre en compte le caractère turbulent de l'écoulement, et donc les fluctuations de vitesse $u'_{g,i}$ autour de la vitesse moyenne $\bar{u}_{g,i}$, il est nécessaire d'utiliser un modèle de dispersion turbulente. Il s'appuie donc sur une décomposition de la vitesse instantanée du gaz vu par la goutte $u_{g,i}$ comme suit :

$$u_{g,i} = \bar{u}_{g,i} + u'_{g,i} \quad (2.13)$$

Les fluctuations de vitesse, ou perturbations de vitesse, sont tirées aléatoirement à partir d'une fonction gaussienne de moyenne nulle, de variance σ :

$$\sigma = \sqrt{\frac{2\tilde{k}}{3}} \quad (2.14)$$

avec $\tilde{k}$ l'énergie cinétique turbulente moyenne, obtenue à l'aide d'un modèle de turbulence du type (k, ε) . C'est une modélisation de la dispersion turbulente très simpliste. Les fluctuations générées devraient être corrélées dans le temps. Cependant, utilisée dans un contexte industriel avec des pas de temps de calcul choisis en considération de la formulation implicite du solveur, cette modélisation s'avère suffisante.

2.2.2 Transfert de masse et de chaleur

Considérons tout d'abord une goutte alimentée en son centre par un tube infiniment fin qui permet de maintenir constant le diamètre lors d'une phase de vaporisation. On se place donc dans le cas "quasi-stationnaire". Et si l'on suppose en plus que la goutte reste sphérique, alors ce problème peut être décrit à l'aide d'une seule variable, la distance par rapport au centre de la goutte. On peut alors déterminer le débit de liquide $\dot{m}_{vap}$ à ajouter pour maintenir la goutte dans son état stationnaire. Avec l'hypothèse de quasi-stationnarité, on peut faire correspondre à ce débit la diminution de rayon de la goutte si celle-ci n'est pas alimentée par ce tube infiniment fin. Le rayon r_d de la goutte non-alimentée est alors directement calculable par :

$$\dot{m}_{vap} = -\frac{d\left(\frac{4}{3}\pi\rho_l r_d^3\right)}{dt} \quad (2.15)$$

La loi du " D^2 " est le résultat de cette approche où l'on montre que la dérivée temporelle du diamètre au carré est constante, compte tenu de l'expression du taux de vaporisation (relations 2.25 ou 2.26) :

$$\frac{dD_d^2}{dt} = -\frac{4\dot{m}_{vap}}{\pi\rho_l D_d} \quad (2.16)$$

Le cœur du problème réside donc dans le calcul du taux de vaporisation $\dot{m}_{vap}$ et de la quantité de chaleur reçue par la phase liquide Q_L , qui dépend directement de ce taux de vaporisation. Ce modèle étant important pour la suite de l'étude, une description du modèle de vaporisation d'Abramzon & Sirignano [61, 62] est proposée ici. C'est un modèle d'évaporation qui se base sur les anciennes approches de Dukowicz [63] et Spalding [64] mais qui y ajoute les effets de films thermique et massique autour de la goutte liquide.

2.2.2.1 Dynamique des gouttes

Ce modèle s’appuie donc sur la loi du D^2 présentée en équation 2.16 et prend en compte :

- des propriétés thermodynamiques variables ;
- l’effet d’un nombre de Lewis différent de 1 dans le film gazeux ;
- l’effet de l’écoulement de Stefan sur le transfert de chaleur et de masse entre la gouttelette et le gaz ;
- l’effet de la circulation interne et du chauffage variable du liquide.

La densité du gaz environnant $\bar{\rho}_\infty$ ainsi que la viscosité dynamique $\bar{\mu}_\infty$ sont pondérées en fonction de la quantité d’air et de la fraction massique de vapeur de fuel. Toutes les données indicées “ ∞ ” correspondent à l’état loin de la goutte. En pratique dans un calcul *RANS*, elles sont reliées aux valeurs moyennes dans chaque cellule de calcul. L’indice s indique quant à lui la valeur “à la surface de la goutte”.

2.2.2.2 Autour de la goutte

Les hypothèses de base sont les suivantes :

- les transferts de chaleur et de masse entre la goutte et le gaz environnant sont considérés comme “quasi-stationnaires” ;
- les propriétés thermophysiques du gaz environnant ne dépendent que des valeurs moyennes dans la cellule de calcul et des valeurs à la surface de la goutte. Des valeurs de références indicées “ δ ” sont donc définies :

$$\bar{T}_\delta = T_s + A_r (T_\infty - T_s) \quad (2.17)$$

$$\bar{Y}_{F,\delta} = Y_{F,s} + A_r (Y_{F,\infty} - Y_{F,s}) \quad (2.18)$$

A_r étant le paramètre de “moyenne”. Yuen et Chen [65] recommandent la valeur 1/3.

Pour prendre en compte les effets engendrés par le mouvement des gouttes par rapport au gaz, le modèle “théorie du film” [66, 67] est utilisé. Ce modèle prend en compte la résistance aux échanges thermique et massique entre la surface de la goutte et le gaz environnant, en introduisant le concept de films gazeux d’épaisseur δ_T et δ_M . Respectivement, ces épaisseurs concernent les films thermique et massique (ou de diffusion pour le dernier). D’après cette théorie, pour une goutte non-vaporisante, l’épaisseur du film thermique a pour valeur :

$$\delta_{T,0} = \frac{D_d}{Nu_0 - 2} \quad (2.19)$$

et par analogie, les auteurs définissent aussi le film massique d’épaisseur :

$$\delta_{M,0} = \frac{D_d}{Sh_0 - 2} \quad (2.20)$$

où $Nu_0 = Nu_0(Re, Pr)$ et $Sh_0 = Sh_0(Re, Sc)$ sont respectivement les nombres adimensionnels de Nusselt et Sherwood. A noter toutefois que ces paramètres ne doivent pas être confondus avec les

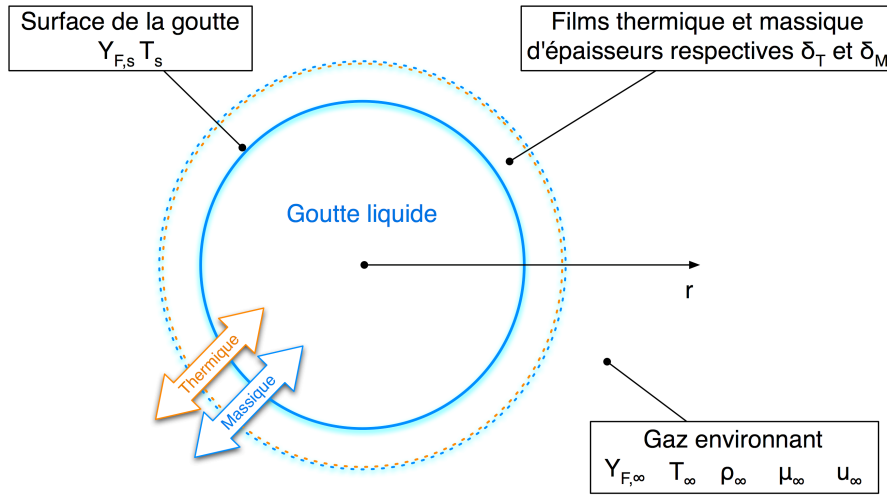


FIG. 2.1 – Représentation schématique des échanges thermique et massique entre du gaz et une goutte liquide

nombre adimensionnel classique, caractérisant respectivement les transferts de chaleur et de masse :

$$Nu = -\frac{2r_d}{T_s - T_\infty} \left(\frac{\partial T}{\partial r} \right)_s \quad (2.21)$$

$$Sh = -\frac{2r_d}{Y_{F,s} - Y_{F,\infty}} \left(\frac{\partial Y_F}{\partial r} \right)_s \quad (2.22)$$

Les deux expressions 2.19 et 2.20 viennent du fait que les taux de transport purement moléculaires par conduction ou par diffusion à travers le film entourant la goutte doivent être égaux aux taux de transfert de masse et/ou de chaleur par convection entre la surface de la goutte et l'écoulement extérieur au film. Les expressions 2.19 et 2.20 sont utilisées pour une goutte vaporisante. Cependant la présence de la vitesse de Stefan (vitesse observée en conséquence de ce transfert de masse et de chaleur de la surface de la goutte vers l'écoulement environnant) influence les valeurs de δ_T et δ_M . Donc, pour prendre en compte cette diminution, un facteur correctif est introduit :

$$F_T = \frac{\delta_T}{\delta_{T,0}} \quad (2.23)$$

$$F_M = \frac{\delta_M}{\delta_{M,0}} \quad (2.24)$$

qui représente le changement d'épaisseur des films dû à la vitesse de Stefan.

Comme dans la plupart des modèles de vaporisation, la température et la fraction massique de vapeur le long de la surface de la goutte sont considérées ici comme uniformes. Cette hypothèse peut avoir tendance à sous-estimer le taux de vaporisation $\dot{m}_{vap}$ puisque la non-linéarité de l'équation de Clausius-Clapeyron ne justifie pas l'utilisation de cette même relation avec des valeurs moyennées le long de la surface de la goutte.

Ce modèle de film s’appuie sur le taux instantané de vaporisation $\dot{m}_{vap}$, exprimé à partir du flux de masse et du flux de chaleur :

$$\dot{m}_{vap} = \pi \bar{\rho}_g \bar{D}_g D_{d,s} Sh^* \ln(1 + B_M) \quad (2.25)$$

$$\dot{m}_{vap} = \pi \frac{\bar{k}_g}{\bar{C}_{p,F}} D_{d,s} Nu^* \ln(1 + B_T) \quad (2.26)$$

où $\bar{\rho}_g$, $\bar{D}_g$ et $\bar{k}_g$ sont respectivement la densité moyenne du gaz, le coefficient de diffusion moléculaire et la conductivité thermique du mélange gazeux dans le film entourant la goutte (prenant donc en compte les différentes espèces présentes en phase gazeuse). $\bar{C}_{p,F}$ est la capacité calorifique moyenne de la vapeur dans le film, Sh^* et Nu^* sont les nombres adimensionnels définis ainsi :

$$Sh^* = 2 + \frac{Sh_0 - 2}{F_M} \quad (2.27)$$

$$Nu^* = 2 + \frac{Nu_0 - 2}{F_T} \quad (2.28)$$

B_M et B_T sont respectivement appelés les paramètres de transfert de masse et de chaleur de Spalding et sont calculés de la manière suivante :

$$B_M = \frac{Y_{F,s} - Y_{F,\infty}}{1 - Y_{F,s}} \quad (2.29)$$

$$B_T = \frac{\bar{C}_{p,F} (T_\infty - T_s)}{L(T_s) + Q_L / \dot{m}_{vap}} \quad (2.30)$$

Y_F est la fraction massique de fuel vapeur, $L(T_s)$ est la chaleur latente de vaporisation à la température T_s . Les taux de vaporisation des équations 2.25 et 2.26 sont très proches des modèles classiques de vaporisation de gouttes. Les seules différences résident dans l’utilisation des nombres Sh^* et Nu^* ici, en lieu et place des Sh_0 et Nu_0 habituels. La formulation de B_M et B_T vient des modèles “classiques” de vaporisation de gouttes (cf Dukowicz [63] et Spalding [64]). Ils sont déterminés suite à un bilan d’énergie et de masse au niveau de la surface de la goutte en intégrant les équations de masse et d’énergie.

Pour déterminer F_M et F_T , les auteurs de ce modèle ont considéré un écoulement de type couche limite laminaire vaporisante. En considérant la surface comme ayant une température uniforme et des propriétés physiques du liquide constantes, les auteurs ont montré que ce problème avait une solution auto-similaire et que les facteurs de correction F_M et F_T ne dépendaient pas du nombre de Reynolds local. Les valeurs observées pour F_M et F_T sont de plus très peu sensibles aux variations des nombres de Schmidt et de Prandtl. Ainsi, F_M et F_T peuvent être exprimés de façon approchée par les deux relations suivantes :

$$F_M = (1 + B_M)^{0.7} \frac{\ln(1 + B_M)}{B_M} \quad (2.31)$$

$$F_T = (1 + B_T)^{0.7} \frac{\ln(1 + B_T)}{B_T} \quad (2.32)$$

Après vérifications avec des données expérimentales, les auteurs suggèrent que ces relations peuvent être utilisées pour des gouttes vaporisantes.

2.2.2.3 Méthodologie - algorithme de calcul

Considérons maintenant la procédure, étape par étape, pour déterminer le taux de vaporisation et la quantité de chaleur transférée à l'intérieur de la goutte Q_L . Partons du principe que la température de la goutte à la surface T_s ainsi que la vitesse du liquide $\bar{u}_l$ et les conditions extérieures à la goutte $\bar{u}_\infty$, T_∞ et $Y_{F,\infty}$ sont connues.

Calcul des fractions molaire et massique de la vapeur à la surface de la goutte à l'aide des relations suivantes :

$$X_{F,s} = \frac{P_{F,s}}{P} \quad (2.33)$$

$$Y_{F,s} = \frac{X_{F,s}W_F}{\sum_i X_i W_i} \quad (2.34)$$

A noter ici que la pression de vapeur saturante peut-être obtenue soit par tabulation expérimentale, soit par la relation de Clausius-Clapeyron ($P_{F,s} = P_{F,s}(T_s)$).

Calcul des propriétés physiques moyennes dans le film entourant la goutte (cf équations 2.17 et 2.18 pour les valeurs de référence pour la température et la fraction massique de fuel vapeur) : $\bar{\rho}_g$, $\bar{C}_{p,F}$, $\bar{C}_{p,g}$, $\bar{k}_g$, $\bar{\mu}_g$, $\bar{D}_g$, $\bar{Pr}$, $\bar{Sc}$ ainsi que le nombre de Lewis :

$$\bar{Le} = \frac{\bar{k}_g}{\bar{\rho}_g \bar{D}_g \bar{C}_{p,g}} \quad (2.35)$$

Calcul des nombres adimensionnels de Nusselt, Sherwood et Reynolds : soit à partir des corrélations de Frossling :

$$Nu_0 = 2 + 0.552 Re^{1/2} Pr^{1/3} \quad (2.36)$$

$$Sh_0 = 2 + 0.552 Re^{1/2} Sc^{1/3} \quad (2.37)$$

soit, plutôt à partir des corrélations fournies par Clift *et al.* [68] :

$$Nu_0 = 1 + (1 + RePr)^{1/3} f(Re) \quad (2.38)$$

$$Sh_0 = 1 + (1 + ReSc)^{1/3} f(Re) \quad (2.39)$$

avec $f(Re) = 1$ si $Re \leq 1$ et $f(Re) = Re^{0.077}$ si $Re \leq 400$. Le second jeu de corrélations semble être plus précis car le premier tend à surestimer le taux de transfert (masse et chaleur) pour des nombres de Reynolds inférieurs à 10.

Calcul du paramètre de transfert de masse de Spalding ainsi que le facteur correctif du film de diffusion F_M , le nombre de Sherwood modifié Sh^* et le taux de vaporisation $\dot{m}_{vap}$ à l'aide des équations 2.25, 2.27, 2.29 et 2.31.

Début du système itératif pour le calcul du paramètre de transfert de chaleur de Spalding

- Première itération, supposition de la valeur pour B_T soit $B_T^* = 0.1$;
- Calcul du facteur correctif pour le film thermique F_T à l’aide de l’équation (2.32) ;
- Calcul du nombre adimensionnel de Nusselt modifié Nu^* à l’aide de l’équation (2.28) ;
- Calcul du paramètre ϕ défini ainsi :

$$\phi = \left(\frac{\bar{C}_{p,F}}{\bar{C}_{p,g}} \right) \left(\frac{Sh^*}{Nu^*} \right) \frac{1}{Le} \quad (2.40)$$

- Calcul de $B_T = (1 + B_M)^\phi - 1$;
- Répéter si $|B_T^* - B_T|$ est supérieur au critère de convergence choisi.

Calcul de la quantité de chaleur reçue par goutte : une fois le taux de vaporisation $\dot{m}_{vap}$ et le paramètre de transfert de chaleur de Spalding B_T déterminés, il vient facilement la quantité de chaleur reçue par la goutte Q_L :

$$Q_L = \dot{m}_{vap} \left(\frac{\bar{C}_{p,F} (T_\infty - T_s)}{B_T} - L(T_s) \right) \quad (2.41)$$

2.2.3 Modélisation lagrangienne du fractionnement d’un jet liquide

Deux types de modèles d’atomisation se distinguent :

- les modèle d’atomisation primaire qui caractérisent comment l’écoulement dans l’injecteur se fractionne, donnant des structures liquides de tailles différentes ;
- les modèles d’atomisation secondaire qui permettent de prédire comment le nuage de gouttes issues de l’atomisation primaire.

Etant donné que les applications concernées par cette étude sont les injections de type Diesel, les modèles présentés dans cette partie concernent les injections de type “trou” qui forment initialement une colonne de liquide.

2.2.3.1 Modèles de fractionnement primaire

Il s’agit de présenter ici les modèles actuels typiquement utilisés pour le fractionnement primaire d’un jet liquide. Par la suite, on hiérarchisera les différents types de modèles :

- les modèles les plus simples, basés sur des corrélations empiriques qui déterminent l’évolution du diamètre moyen D_{32} des gouttes formées ;
- les modèles qui utilisent la théorie linéaire des instabilités (cf section 1.3.3 du chapitre 1) pour déterminer l’amplitude et la fréquence de l’onde surfacique la plus instable qui conduira au fractionnement du jet liquide évolue.

Ces modèles de fractionnement primaire servent à établir les conditions initiales au calcul lagrangien : distributions de taille, de vitesse des gouttes, etc., dès la sortie de l’injecteur. Cela revient à sous-entendre que la zone d’atomisation primaire n’est pas réellement simulée, ce qui correspond en pratique à négliger l’écoulement dans cette zone.

La corrélation d'ElKotb [69] est empirique et considère que le fractionnement du jet se fait dès la sortie de l'injecteur, produisant des gouttes qui ont toutes le même diamètre moyen D_{32} , dit "de Sauter". Ce diamètre est défini tel que :

$$D_{32} = \frac{\text{Volume du spray}}{\text{Surface du spray}} \quad (2.42)$$

ElKotb [69] propose la relation suivante :

$$D_{32} = 3.08 \cdot 10^6 \nu_l^{0.385} \sigma_l^{0.737} \rho_l^{0.737} \rho_g^{0.706} \Delta P^{-0.54} \quad (2.43)$$

avec :

$$\Delta P = \frac{\rho_l u_{inj}^2}{2C_d^2} \quad (2.44)$$

σ_l correspond ici à la tension de surface du liquide, ν_l à la viscosité cinématique du liquide, ΔP à la différence de pression entre l'amont et l'aval de l'injecteur et C_d au coefficient de décharge dans l'injecteur. On remarquera que cette relation empirique ne fait pas apparaître explicitement ni le nombre de Weber, ni le nombre de Reynolds. L'influence de la vitesse d'injection u_{inj} n'est qu'en partie visible, par le biais du différentiel de pression. De plus, le diamètre de l'injecteur n'influence pas la taille des gouttes formées en sortie d'injecteur.

La corrélation d'Hiroyasu-Arai-Tabati [70] a, elle aussi, été déterminée suite à des séries de mesures expérimentales. Le diamètre moyen de Sauter est évalué en prenant la valeur la plus grande des deux expressions suivantes :

$$D_{32,a} = 4.12 Re_l^{0.12} We_l^{-0.75} \left(\frac{\mu_l}{\mu_g} \right)^{0.54} \left(\frac{\rho_l}{\rho_g} \right)^{0.18} D_{inj} \quad (2.45)$$

ou :

$$D_{32,b} = 0.38 Re_l^{0.25} We_l^{-0.32} \left(\frac{\mu_l}{\mu_g} \right)^{0.37} \left(\frac{\rho_l}{\rho_g} \right)^{-0.47} D_{inj} \quad (2.46)$$

μ_l et μ_g correspondent respectivement aux viscosités du liquide et du gaz, ρ_l et ρ_g sont respectivement les densités du liquide et du gaz. Contrairement à la corrélation proposée par Elkotb [69], celle présentée ici prend en compte l'influence du diamètre de l'injecteur, ainsi que les nombres de Reynolds Re_l et de Weber We_l associés au liquide.

Le modèle de Reitz ou modèle "Wave" [10] se base sur l'étude de l'instabilité linéaire d'une colonne de liquide injectée dans un environnement gazeux incompressible (cf section 1.3.3 du chapitre 1). L'auteur suppose que l'atomisation est due au développement d'instabilités de surface de type Kelvin - Helmholtz à la sortie de l'injecteur. Une représentation schématique est proposée en figure 2.2.

Ce modèle, appliqué avec un formalisme lagrangien, consiste à représenter la colonne de liquide par des particules liquides plus ou moins sphériques ("*blobs*"), initialement de diamètre égal à l'orifice d'injection. Le nombre de particules créées par pas de temps de calcul est déterminé en fonction du débit de carburant liquide.

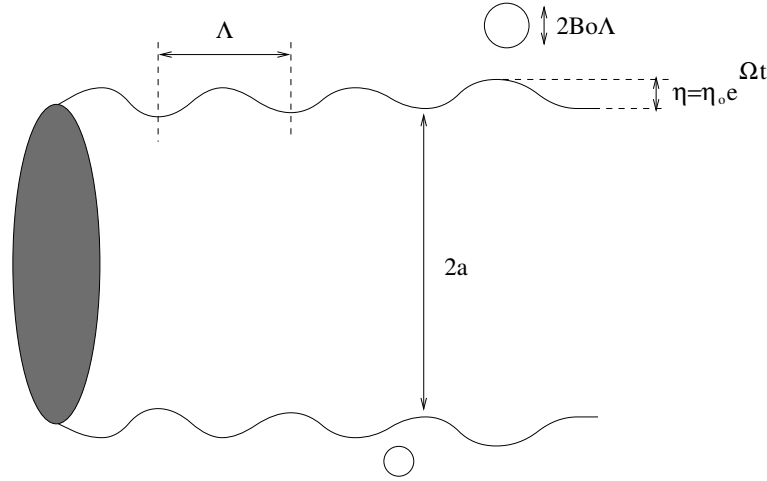


FIG. 2.2 – Etude de stabilité d’une colonne de liquide en vue d’une modélisation de type “Wave” [10]

Cette analyse linéaire permet à Reitz [10] de déterminer la longueur d’onde Λ_{KH} dont l’amplitude croît le plus rapidement, ainsi que son taux d’accroissement Ω_{KH} . Les expressions suivantes sont obtenues suite à des études théoriques sur le comportement des nombres adimensionnels d’Ohnesorge et de Weber.

$$\frac{\Lambda_{KH}}{r_1} = 9.02 \frac{(1 + 0.45\sqrt{Oh})(1 + 0.4Ta^{0.7})}{(1 + 0.865We_g^{1.67})^{0.6}} \quad (2.47)$$

$$\Omega_{KH} \sqrt{\frac{\rho_l r_1^3}{\sigma_l}} = \frac{0.34 + 0.385We_g^{1.5}}{(1 + Oh)(1 + 1.4Ta^{0.6})} \quad (2.48)$$

avec $Ta = Oh\sqrt{We_g}$. r_1 est le rayon de la goutte mère. On appelle “goutte(s) mère(s)” la ou les goutte(s) avant rupture, et “goutte(s) fille(s)” la ou les goutte(s) issue(s) de la goutte mère, après rupture. Ces gouttes filles ont, après rupture, un rayon r_2 déterminé ainsi :

$$r_2 = \begin{cases} B_0 \Lambda_{KH} & \text{si } B_0 \Lambda_{KH} \leq r_1 \\ \min \left[\left(\frac{3\pi a^2 u_l}{2\Omega_{KH}} \right)^{\frac{1}{3}}, \left(\frac{3a^2 \Lambda_{KH}}{4} \right)^{\frac{1}{3}} \right] & \text{si } B_0 \Lambda_{KH} > r_1 \text{ (régime de Rayleigh)} \end{cases} \quad (2.49)$$

B_0 est une constante de modélisation prise généralement égale à 0.61. Le cas particulier $B_0 \Lambda_{KH} > r_1$ correspond au régime de fractionnement de Rayleigh. En effet, c’est uniquement en présence de ce régime de rupture que les gouttes détachées de la colonne liquide ont un diamètre plus grand que celui de la colonne elle-même. En ce qui concerne les injections haute pression de type spray Diesel, comme il a déjà été vu précédemment, c’est en régime d’atomisation que le jet liquide se fractionne. Ainsi, le rayon des gouttes filles prédit par le modèle “Wave” sera plutôt de l’ordre de grandeur de Λ_{KH} , à une constante de modélisation près.

La taille de la goutte fille est ainsi déterminée à partir du volume de liquide contenu dans une onde de surface. Avec un formalisme lagrangien, la taille des gouttes décroît pendant le temps de breakup

$\tau_{bu,KH}$, suivant cette loi d'évolution temporelle :

$$\frac{dr_1}{dt} = \frac{r_2 - r_1}{\tau_{bu,KH}} \quad (\text{avec } r_2 \ll r_1) \quad (2.50)$$

Contrairement au modèle TAB, présenté par la suite, la diminution de la taille des gouttes mères est linéaire dans le temps (figure 2.3). Il est possible d'exprimer le temps de breakup $\tau_{bu,KH}$ en fonction de la longueur d'onde Λ_{KH} , de son taux de croissance Ω_{KH} et le rayon des gouttes mères r_1 :

$$\tau_{bu,KH} = 3.726 B_1 \frac{r_1}{\Lambda_{KH} \Omega_{KH}} \quad \text{avec} \quad r_1(t = t_0) = a \quad (2.51)$$

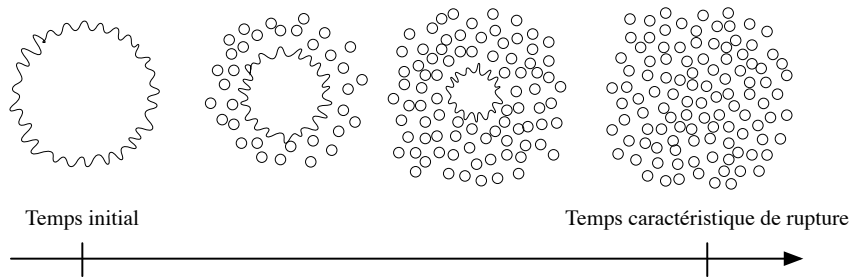


FIG. 2.3 – Désintégration de la goutte mère pendant le temps de rupture τ_{bu} selon le modèle “Wave” [10]

L’auteur fixe la constante B_1 aux alentours de 10, admettant que cette valeur peut être modifiée sous influence de la géométrie de l’injecteur sur le spray formé dans la chambre. De plus, ce modèle prévoit une composante de vitesse radiale pour les gouttes filles :

$$V_0 = U_0 \tan\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (2.52)$$

Elle est uniformément distribuée entre 0 et θ , angle du spray, défini par la relation suivante :

$$\tan\left(\frac{\theta}{2}\right) = A_1 \Lambda_{KH} \frac{\Omega_{KH}}{U_0} \quad (2.53)$$

A_1 étant une constante de modélisation qui est fonction du design de la buse. L’auteur [10] propose de la prendre égale à 0.188.

Le modèle de Patterson - Reitz ou modèle “KH - RT” [71] (pour *Kelvin Helmholtz - Rayleigh Taylor*) est basé sur le modèle “Wave” de Reitz, présenté au paragraphe précédent. Il y ajoute la prise en compte des instabilités de Rayleigh - Taylor dans la désintégration du jet à la sortie de l’orifice d’injection. En effet, ces instabilités sont dues aux accélérations normales à la surface d’une interface entre deux fluides de masse volumique différente. Le principe de ce modèle est le suivant : l’instabilité qui engendrera l’onde produisant la déstabilisation la plus rapide sera choisie pour modéliser le fractionnement.

Pour l’instabilité de Rayleigh - Taylor, la perturbation qui se développe le plus rapidement a une longueur d’onde Λ_{RT} et un taux de croissance Ω_{RT} définis de la façon suivante :

$$\Lambda_{RT} = \frac{4\pi}{\rho_g u_r} \sqrt{\frac{2\sigma_l \rho_l r_1}{C_d}} \quad (2.54)$$

$$\Omega_{RT} = \frac{u_r}{2} \sqrt{\frac{C_d \rho_g u_r}{2\rho_l r_1}} \sqrt{\frac{C_d \rho_g}{2r_1 \sigma_l}} \quad (2.55)$$

u_r étant la vitesse relative liquide/gaz.

En ce qui concerne le temps de rupture, en présence d’une instabilité de Rayleigh - Taylor, il diffère et s’exprime désormais de la façon suivante :

$$\tau_{bu,RT} = \sqrt{\frac{8\rho_l}{C_d \rho_g}} \sqrt{\frac{2}{C_d W_{el}}} \quad (2.56)$$

Le modèle de Huh et Gosman [11, 72] tente de faire un lien entre l’écoulement dans l’injecteur et le processus d’atomisation. Après une analyse d’ordres de grandeur, les auteurs partent du principe que la turbulence du jet et l’inertie du gaz sont les deux seuls facteurs prépondérants dans le processus d’atomisation [11]. Le modèle d’atomisation proposé ici considère donc les effets à la fois de l’amplification de l’onde infinitésimale sur la surface du jet et la turbulence. Les auteurs insistent sur la prédominance de la turbulence en indiquant qu’elle est plus efficace pour amplifier les perturbations initiales de la surface que le mécanisme d’amplification d’ondes lui-même.

Deux hypothèses sont donc posées. La première consiste à considérer l’échelle de longueur turbulente L_t comme l’échelle dominante de l’atomisation :

$$L_A = C_1 L_t + C_2 L_\omega \quad (2.57)$$

avec L_ω la longueur d’onde des perturbations de surface. Les auteurs proposent de fixer les constantes comme suit. $C_1 = 2$, ce qui correspond à considérer la longueur caractéristique de l’atomisation comme étant deux fois l’échelle intégrale de la turbulence et $C_2 = 1/2$, seulement la moitié de l’onde de surface est supposée se détacher pour former une goutte.

La seconde hypothèse consiste à dire que l’échelle de temps de l’atomisation est une combinaison linéaire de l’échelle de temps de la turbulence τ_t et celle des ondes de surface τ_ω :

$$\tau_A = C_3 \tau_t + C_4 \tau_\omega \quad (2.58)$$

$C_3 = 1.2$ et $C_4 = 0.5$ étant fixées par les auteurs grâce à des comparaisons expérimentales.

La mesure du niveau de turbulence dans les écoulements à l’intérieur même des injecteurs n’étant pas tâche facile, les auteurs proposent d’estimer l’énergie cinétique turbulente $\bar{k}$ et son taux de dissipation $\bar{\varepsilon}$ à l’aide des relations suivantes :

$$\bar{k} = \frac{u_r^2 D_0}{8L_0} \left[\frac{1}{C_d^2} - K_c \right] \quad (2.59)$$

$$\bar{\varepsilon} = \frac{u_r^3 D_0}{L_0} \left[\frac{1}{C_d^2} - K_c \right] \quad (2.60)$$

avec L_0 la longueur de la buse, D_0 le diamètre de la buse, C_d le coefficient de décharge de l'injecteur et K_c une constante de modélisation.

La turbulence interne des gouttes mères décroît avec le temps. Si la goutte est supposée avoir une turbulence isotrope homogène sans production, il devient possible de résoudre le système suivant :

$$\frac{d\bar{k}}{dt} = -\bar{\varepsilon} \quad (2.61)$$

$$\bar{\varepsilon} = -c_\varepsilon \frac{\bar{\varepsilon}^2}{\bar{k}} \quad (2.62)$$

Les échelles de temps et de longueur de la turbulence peuvent alors être déterminées, en fonction du temps t et des conditions initiales grâce aux corrélations suivantes :

$$L_t(t) = L_t^0 \left(1 + \frac{0.0828t}{\tau_t^0} \right)^{0.457} \quad (2.63)$$

$$\tau_t(t) = \tau_t^0 + 0.0828t \quad (2.64)$$

avec L_t^0 et τ_t^0 les conditions initiales de la turbulence à la sortie de l'injecteur, données à partir des relations 2.59 et 2.60.

A partir d'une analyse linéaire des instabilités de type Kelvin - Helmholtz, en négligeant les effets de tension de surface et de viscosité du liquide (cf section 1.3.3 du chapitre 1), il est possible de déterminer le temps caractéristique d'amplification d'onde τ_ω :

$$\tau_\omega = \frac{L_\omega}{u_r} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \quad (2.65)$$

Enfin, l'angle du spray se détermine à partir de la relation suivante :

$$\tan\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{L_A/\tau_A}{u_r} \quad (2.66)$$

et le taux de rupture primaire, comme suit :

$$\frac{dr_1}{dt} = k_1 \frac{L_A}{\tau_A} \quad \text{ou} \quad \frac{dr_1}{dt} = k_2 \frac{L_\omega}{\tau_\omega} \quad (2.67)$$

k_1 et k_2 étant deux constantes de modélisation, ajustées à l'aide de comparaisons expérimentales en termes de pénétration liquide et de distribution de taille de gouttes. Les auteurs proposent ici $k_1 = 0.1$ et $k_2 = 0.02$. La taille des gouttes filles est déterminée de la même façon que Reitz [10].

2.2.3.2 Modèles de fractionnement secondaire

Jusqu'à présent, les modèles décrits ci-dessus servaient à initier les conditions de calculs lagrangiens sensés représenter des sprays dilués : distributions de taille, de vitesse des gouttes, etc. Il s'agit maintenant de s'intéresser aux modèles de fractionnement secondaire qui déterminent plus spécifiquement l'évolution de la taille des gouttes une fois détachées du cœur liquide.

Le modèle de Reitz - Diwakar [73, 74] est un modèle de fractionnement fondé sur les travaux de Nicholls [75]. Ce dernier a étudié la rupture d’une goutte dans un écoulement gazeux à forte vitesse, en présence d’une onde de choc et propose d’identifier deux principaux régimes de fractionnement d’une goutte liquide.

Le fractionnement en “sac” (ou “*bag breakup*” - représenté sur la partie gauche de la figure 2.4) a lieu pour des nombres adimensionnels de Weber gazeux inférieurs à 12. Lors de ce type de fractionnement, la goutte voit sa partie centrale se bomber vers l’aval de l’écoulement, forcé par l’aérodynamique du gaz, pour ensuite exploser en plusieurs petites gouttes. Le “bord” du sac se désintègre plus tard, sous la forme d’un ligament, donnant naissance à des gouttes filles de taille plus importante. Selon les auteurs [73, 74], le temps de rupture relatif à ce régime de fractionnement se calcule de la sorte :

$$\tau_{bu,bag\ breakup} = C_{bb} \sqrt{\frac{\rho_l r_1^3}{\sigma_l}} \quad (2.68)$$

Le fractionnement par arrachement (ou “*stripping breakup*” - représenté sur la partie droite de la figure 2.4) a lieu pour $We_g > \sqrt{Re_g}$. Ici, ni sac, ni bord de sac ne sont formés lors de la rupture mais plutôt des fragments liquides formés à la périphérie de la goutte, qui se retrouve déformée et cisailée. Durant ce type de fractionnement, la goutte mère est épluchée progressivement et il y a création de gouttes filles de taille très inférieure à celle de la goutte mère. Les auteurs proposent un temps de rupture défini ainsi :

$$\tau_{bu,stripping\ breakup} = C_{sb} \frac{r_1}{u_r} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \quad (2.69)$$

Pour chaque goutte, une analyse du régime de fractionnement est effectuée et en fonction du type de rupture, l’un ou l’autre des temps de rupture est choisi, en fonction du nombre de Weber. De plus, le modèle tient compte de la conservation de la masse pour déterminer le nombre de gouttes filles, ainsi qu’une diminution de l’énergie cinétique globale afin de prendre en compte la transformation d’une partie de cette dernière en énergie de surface, lors de la formation de nouvelles gouttes.

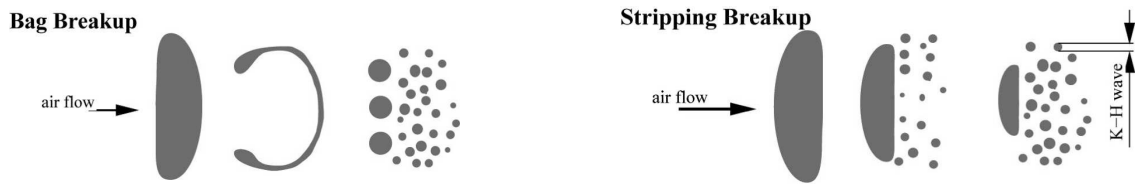


FIG. 2.4 – A gauche, un régime de “*bag breakup*” ($We_g > 12$) - à droite, un régime de “*stripping breakup*” ($We_g > \sqrt{Re_g}$)

Cependant, pour O’Rourke et Amsden [76], le second critère, caractérisant le régime d’arrachement, est critiquable car il implique la viscosité du gaz (par l’intermédiaire du nombre adimensionnel de Reynolds) dans le phénomène. Or, cette dernière n’intervient pas dans l’expression du temps de rupture $\tau_{bu,stripping\ breakup}$, ce qui est confirmé par certaines expériences : les temps de rupture mesurés seraient indépendants de la viscosité du gaz. De plus, la détermination des constantes C_{bb} et C_{sb} diffère fortement selon les auteurs et les études.

L'année suivante, Reitz et Diwakar [74] proposent un modèle amélioré, supposant que le rayon des gouttes r_1 diminue de façon continue dans le temps, en présence d'un régime par arrachement (d'après ces mêmes auteurs, c'est le régime de rupture prépondérant) :

$$\frac{dr_1}{dt} = \frac{r_{crit} - r_1}{\tau_{bu,stripping\ breakup}} \quad (2.70)$$

avec un rayon "critique" r_{crit} défini de la façon suivante :

$$r_{crit} = \frac{\sigma_l^2}{2\rho_g^2 u_r^3 \nu_g} \quad (2.71)$$

L'angle θ du spray fait intervenir le ratio des masses volumiques liquide et le gaz :

$$\tan\left(\frac{\theta}{2}\right) = C_\theta \sqrt{\frac{\rho_g}{\rho_l}} \quad (2.72)$$

avec C_θ une constante de modélisation généralement fixée à 0.7 mais qui, dans l'absolu, dépend de la géométrie de l'injecteur et des caractéristiques physiques du liquide.

Ce modèle de rupture secondaire est basé sur des corrélations empiriques et des critères de stabilité obtenus lors d'expérimentations en phase dispersée. L'hypothèse de départ du modèle est donc que chaque goutte du jet n'est pas affectée par les gouttes aux alentours. Ceci est un caractère limitant du modèle en zone dense du jet, près de l'injecteur, là où l'interaction goutte - goutte n'est plus négligeable.

Le modèle TAB (pour "Taylor Analogy Breakup") a été proposé par O'Rourke et Amsden [76] en 1987 et se base, comme son nom le suppose, sur une analogie proposée par Taylor entre l'oscillation d'une goutte et celle d'un système [Masse + Ressort] de masse m . En effet, dans cette analogie, la force de raideur k du ressort est apparentée à celle de tension de surface σ_l . De plus, les forces aérodynamiques sont considérées comme un forçage extérieur. Les auteurs ont ajouté à cette analogie la notion de force d'atténuation, ou force d'amortissement d due aux forces de viscosité du liquide. L'équation d'un oscillateur harmonique forcé et amorti est :

$$m\ddot{x} = F - kx - d\dot{x} \quad (2.73)$$

x étant défini comme le déplacement de l'équateur de la goutte liquide de sa position d'équilibre (cf figure 2.5).

En se référant à l'approche de Taylor, les paramètres adaptés au cas d'une goutte sont les suivants :

$$\frac{F}{m} = C_f \frac{\rho_g u_r^2}{\rho_l r_1} \quad ; \quad \frac{k}{m} = C_k \frac{\sigma_l}{\rho_l r_1^3} \quad ; \quad \frac{d}{m} = C_d \frac{\mu_l}{\rho_l r_1^2} \quad (2.74)$$

Adimensionnant x par $y = x / (C_b r_1)$ dans l'équation 2.73, on obtient finalement l'équation 2.75 :

$$\ddot{y} + C_d \frac{\mu_l}{\rho_l r_1^2} \dot{y} + C_k \frac{\sigma_l}{\rho_l r_1^3} y = \frac{C_f \rho_g u_r^2}{C_b \rho_l r_1} \quad (2.75)$$

C_b , C_d , C_k et C_f sont des constantes de modélisation introduites par les auteurs, déterminées à l'aide de comparaisons avec des résultats expérimentaux : $C_b = 0.5$, $C_d = 10$, $C_k = 8$ et $C_f = 1/3$.

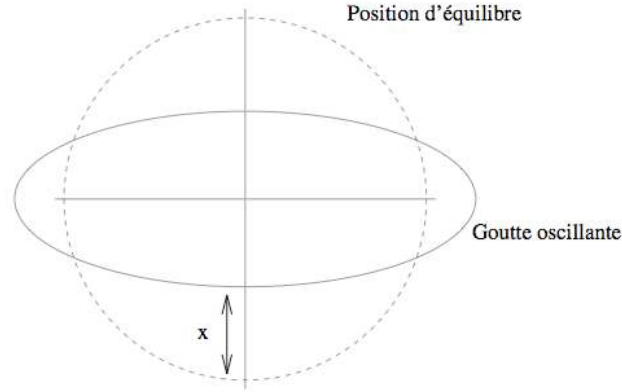


FIG. 2.5 – Oscillation de la goutte liquide autour de son état d'équilibre

En considérant le régime d'atomisation, un développement de Taylor permet d'obtenir un temps de breakup, défini en équation 2.76 pour un régime de “*stripping breakup*”, présenté en figure 2.4.

$$\tau_{bu,stripping\ breakup} = \sqrt{3} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \frac{r_1}{u_r} \quad (2.76)$$

Si par contre, c'est en régime de “*bag breakup*” que la goutte liquide va se briser, un autre temps de breakup est défini en négligeant le terme de viscosité :

$$\tau_{bu,bag\ breakup} = \frac{\pi}{\sqrt{8}} \sqrt{\frac{\rho_l r_1^3}{\sigma_l}} \quad (2.77)$$

Pour prédire la vitesse normale des gouttes filles issues de la rupture de gouttes mères et donc indirectement l'angle du spray, l'hypothèse suivante est utilisée par les auteurs : à l'instant précis de la rupture, l'équateur de la goutte se déplace vers l'extérieur avec une vitesse $\dot{x} = C_b r_1 \dot{\gamma}$. De cette hypothèse, il devient envisageable que les gouttes filles aient une vitesse normale du type :

$$V_0 = C_v C_b r_1 \dot{\gamma} \quad (2.78)$$

où $C_v \approx 1$. Il vient alors aisément l'angle du spray θ , en fonction de cette vitesse normale V_0 :

$$\tan\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{V_0}{u_r} = C_v \frac{\sqrt{3}}{3} \sqrt{\frac{\rho_g}{\rho_l}} \quad (2.79)$$

Cette équation ne tient nullement compte du rapport L_0/D_0 (longueur du tube à l'intérieur de l'injecteur divisé par le diamètre de l'orifice de sortie). En effet, de nombreuses études ont montré une influence de ce rapport sur l'angle de spray. Néanmoins, avec ce modèle, en donnant une oscillation initiale aux grandes gouttes injectées, l'angle initial peut varier. Ainsi l'influence de la géométrie de l'injecteur serait en partie prise en compte.

Ce modèle prévoit aussi une évolution de la taille des gouttes après rupture primaire. C'est une méthode basée sur la conservation de l'énergie, en appliquant un bilan au niveau de la goutte mère

avant rupture et au niveau des gouttes filles après rupture. Une loi d'évolution de la taille des gouttes peut ainsi être proposée :

$$\frac{r_1}{r_{32}} = 1 + \frac{8K}{20} + \frac{\rho_l r_1^3}{\sigma_l} \dot{\gamma}^2 \left(\frac{6K - 25}{120} \right) \quad (2.80)$$

r_{32} est le rayon moyen de Sauter des gouttes filles. Ce rayon, comme défini à l'équation 2.42, est un rapport entre le volume du spray et la surface du spray. La taille des gouttes filles est ainsi déterminée par un tirage aléatoire dans une distribution en χ^2 ayant comme rayon moyen de Sauter $r = r_{32}$. La valeur de K est une constante de modélisation, déterminée grâce à des comparaisons expérimentales. Les auteurs proposent $K = 10/3$.

Le modèle de Pilch - Erdman [77] est en fait un modèle d'atomisation secondaire basé sur un ensemble de corrélations obtenues expérimentalement pour la détermination du temps de rupture τ_{bu} . Comparé aux deux modèles précédents, celui-ci prend en compte la viscosité du liquide en introduisant le nombre d'Ohnesorge Oh dans le calcul d'un nombre de Weber critique We_{crit} :

$$We_{crit} = 12 (1 + 1.077 Oh^{1.6}) \quad (2.81)$$

Cette relation indique un rôle limitant de la viscosité du liquide dans le phénomène de rupture secondaire des gouttes. Si par contre, la viscosité du liquide est négligée, le nombre d'Ohnesorge devient négligeable et le nombre de Weber We_{crit} tend vers la valeur 12, conformément aux modèles proposés par Reitz et Diwakar [73, 74] d'une part, par O'Rourke et Amsden (modèle "TAB") [76] d'autre part.

Pilch et Erdman proposent un temps de désintégration de la goutte du type :

$$\tau_{rupt} = C_1 T \frac{2r_1}{u_r} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \quad (2.82)$$

T est une fonction proposée par les auteurs qui varie en fonction du nombre de Weber associé au gaz et C_1 une constante de modélisation. Six régimes de rupture sont définis :

$$T = \begin{cases} 6 (We_g - 12)^{-0.25} & \text{pour } 12 \leq We_g < 18 \\ 2.45 (We_g - 12)^{0.25} & \text{pour } 18 \leq We_g < 45 \\ 14.1 (We_g - 12)^{-0.25} & \text{pour } 45 \leq We_g < 351 \\ 0.766 (We_g - 12)^{0.25} & \text{pour } 351 \leq We_g < 2670 \\ 5 & \text{pour } We_g \geq 2670 \end{cases} \quad (2.83)$$

En ce qui concerne le rayon "critique" r_{crit} des gouttes, les auteurs supposent que son expression doit faire intervenir la vitesse relative liquide/gaz u_r :

$$r_{crit} = We_{crit} \frac{\sigma_l}{2\rho_g u_r^2} \quad (2.84)$$

Le modèle "Wave - FIPA" (pour Fractionnement Induit Par Accélération) [78] est proposé par Habchi *et al.* en 1997 et tente de prendre en compte les effets de densité locale du spray, près du nez de l'injecteur par exemple, pour la détermination des constantes de modélisation intervenant dans le calcul du temps de rupture. En effet, cette approche fait la distinction entre le temps de

rupture des grands paquets détachés du cœur liquide et celui des gouttes sphériques plus en aval de l'écoulement. Le principe est le suivant : pour les premiers “blobs” liquides détachés du cœur, le modèle “Wave” proposé par Reitz [10] est choisi alors que pour les petites gouttes en rupture secondaire, les corrélations de Pilch et Erdman [77] décrites plus haut sont utilisées.

Par comparaisons avec l'expérience, le modèle “Wave” offre en effet une relativement bonne prédiction sur les temps de rupture lorsque la vitesse relative liquide/gaz u_r est bien estimée numériquement. Or, ceci est rarement le cas, en considérant les maillages utilisés qui sont souvent un peu grossiers. Avec ce modèle, les utilisateurs corrigent le problème en modifiant les différentes constantes utilisées (et donc indirectement le nombre de Weber), afin de réévaluer les vitesses relatives liquide/gaz. L'idée ici est donc de proposer une modification automatique des constantes en fonction de la densité locale du spray considéré. Par exemple, quand le spray est dense, près de la buse d'injection, la vitesse relative liquide/gaz est considérée comme faible et donc les instabilités qui s'y développent sont atténuées. La constante de breakup B_1 utilisée à l'équation 2.51 doit alors être augmentée.

En ce qui concerne le temps de rupture des petites gouttes, s'appuyant sur les corrélations de Pilch et Erdman [77], c'est la constante C_1 définie à l'équation 2.82 qui doit être modifiée. L'algorithme de calcul des différentes constante n'est pas exposé ici mais se base sur un calcul des distances entre gouttes, pour relier ensuite la densité locale du spray aux valeurs des constantes B_1 et C_1 .

2.3 Bilan sur les limitations des approches standards

D'une manière générale, l'approche lagrangienne et les modèles qui en découlent pour la simulation des sprays donne de bons résultats pour les injections à faible vitesse et/ou pour les sprays dispersés. Cependant, lorsque la pression d'injection augmente ou lorsque le spray est très dense, les modèles lagrangiens deviennent mal adaptés, tant d'un point de vue numérique que physique.

Sur le plan numérique, l'hypothèse fondamentale de la modélisation lagrangienne qui est de considérer des particules liquides détachées les unes des autres n'est pas vérifiée près de la buse d'injection. Dans le cas des maillages utilisés en modélisation de la combustion diphasique de type Diesel, les mailles proches du nez de l'injecteur ont une taille avoisinant les $50\mu m$. Or, en vue des diamètres d'injecteurs actuels, il est tout à fait possible d'avoir plusieurs mailles de calcul en face de l'orifice de sortie. Dans cette zone du calcul, le volume de la phase liquide est alors bien plus important que celui du gaz (il peut atteindre 100%). De plus, l'approche lagrangienne est une approche statistique. Or, pour une bonne résolution statistique de l'écoulement, un nombre de particules stochastique important est requis. Un tel nombre de particules est rarement atteint en calculs moteur, pour des raisons de temps *CPU* (pour “*Calculation Processing Unit*”) trop importants.

Sur le plan physique, les limitations se situent au niveau du couplage entre l'écoulement interne à la buse d'injection et le développement du spray dans la chambre de combustion. Certains modèles comme celui proposé par Huh et Gosman [11, 72] tentent de prendre en compte les effets de la turbulence de la phase liquide à l'aide de corrélations. La théorie linéaire des instabilités, qui est à la base de la majorité des modèles d'atomisation lagrangiens, est souvent appliquée pour des cas simples ne prenant pas en

compte les géométries d'injecteur. De plus, la présence d'une zone dense près du nez de l'injecteur qui implique de fortes interactions entre les phases liquide et gaz n'est pas prise en compte par ce type de modèles. Seul le modèle proposé par Habchi *et al.* [78] connu sous le nom de "Wave - FIPA" essaie de prendre en compte la densité du spray dans le calcul des constantes de modélisation. Bien que la modification de ces constantes soit un pas en avant, il ne semble pas suffisant pour prendre en compte les mécanismes physiques complexes qui rentrent en jeu dans cette zone de l'écoulement. Enfin, cette zone dense étant très difficilement accessible aux outils de diagnostic optique, les validations des modèles deviennent délicates.

Chapitre 3

Le modèle Euler - Lagrange pour les Sprays et l'Atomisation

Ce modèle, surnommé “*ELSA*” (pour *Euler - Lagrange pour les Sprays et l'Atomisation*), est un modèle développé initialement par Vallet, Burluka et Borghi [79, 80] pour prendre en compte la présence de la zone dense de liquide près du nez de l'injecteur. En effet, c'est dans cette optique que l'idée de mélange turbulent entre les phases liquide et gaz ainsi que le transport de la quantité d'interface liquide/gaz ont été introduites. L'article de Vallet [79] propose en 2001 une première comparaison avec des résultats expérimentaux. Blokkeel [81, 82] ajoute ensuite, en 2003 la possibilité de coupler une représentation eulérienne en zone dense près de l'injecteur avec une formulation lagrangienne en zone diluée, en vue d'une adaptation du modèle dans le code KIVA-II où un nombre important de modèles lagrangiens pour la vaporisation et les interactions spray/parois sont déjà disponibles.

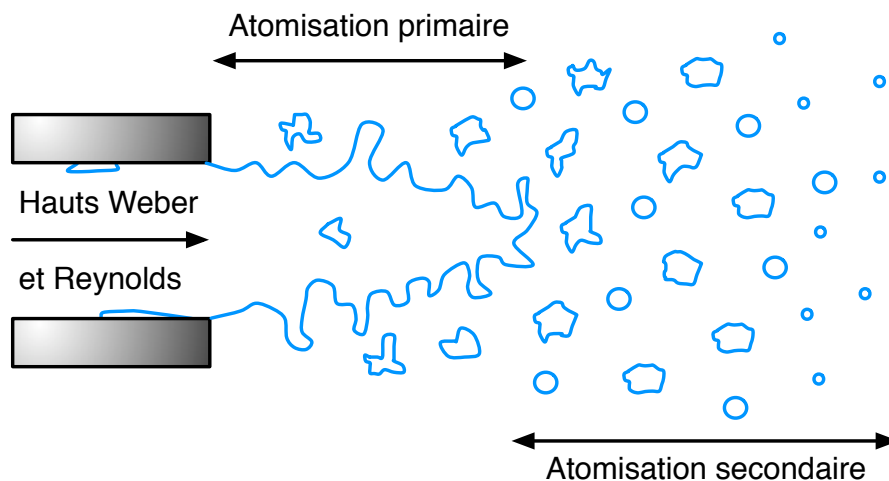


FIG. 3.1 – Représentation schématique de l'atomisation d'un jet liquide haute pression de type Diesel

Beau [83, 84, 85] propose plus récemment une évolution de l'équation de transport de la quantité d'interface liquide/gaz, à l'aide de comparaisons avec des calculs DNS obtenus par Ménard *et al.* [21,

86]. Il démontre aussi comment il est possible d'avoir avec le modèle *ELSA* une représentation similaire aux approches de type *multiphase flow* décrites au chapitre précédent, grâce à un jeu d'équations de transport pour le flux turbulent de liquide.

Par la suite, le régime de fractionnement du jet sera considéré comme étant celui de l'atomisation. L'injection se fera à grande vitesse : le modèle *ELSA* est actuellement développé avec l'hypothèse de haut Weber et haut Reynolds. Les forces de tension de surface et de viscosité du liquide sont ainsi considérées comme négligeables devant les forces d'inertie en ce qui concerne les grandes échelles de l'écoulement (figure 3.1). Cette condition est généralement observée lors d'injections haute pression de type "*Injection Directe*", qu'elles soient en moteur Diesel ou essence.

De plus, ce modèle part du principe que dans la zone dense, près de la buse d'injection, une approche eulérienne est mieux adaptée du fait des fortes interactions entre les phases liquide et gaz. Ce mélange liquide/gaz sera alors considéré par la suite comme un mélange turbulent à masse volumique fortement variable, bien que la turbulence observée près de l'injecteur soit particulière, de par son caractère diphasique. Le choix du mélange liquide/gaz permet aussi de s'affranchir en partie de termes interfaciaux souvent difficiles à appréhender.

3.1 Modélisation de la turbulence diphasique et de la dispersion du liquide

Ce modèle est un modèle de turbulence généralisée appliqué au mélange liquide - gaz. Il est donc nécessaire de rappeler tout d'abord les équations utilisées pour la modélisation de la turbulence ainsi que les notations qui seront utilisées par la suite.

3.1.1 Moyenne de Reynolds et moyenne de Favre

En présence d'écoulements compressibles, les équations de transport régissant leur comportement physique font intervenir des dérivées de quantités volumiques $\rho\Phi$. Il serait tout à fait envisageable d'utiliser la décomposition classique de Reynolds suivante pour les écoulements incompressibles :

$$\begin{cases} \rho\Phi &= \overline{\rho\Phi} + (\rho\Phi)' \\ \overline{(\rho\Phi)'} &= 0 \end{cases} \quad (3.1)$$

mais il se peut tout à fait qu'expérimentalement, les mesures obtenues ne soient pas des grandeurs volumiques. Dans cette optique, Favre propose une nouvelle prise de moyenne, cette fois pondérée par la masse volumique :

$$\begin{cases} \rho &= \bar{\rho} + \rho' \\ \Phi &= \tilde{\Phi} + \Phi'' \end{cases} \quad \text{avec} \quad \bar{\rho}\tilde{\Phi} = \overline{\rho\Phi} \quad (3.2)$$

Par opposition à la prise de moyenne de Reynolds, la moyenne des fluctuations $\overline{\Phi''}$ n'est pas nulle mais par contre $\overline{\rho\Phi''} = 0$. Cette approche est retenue par la suite.

3.1.2 Introduction de la densité moyenne de mélange liquide/gaz

Comme décrit précédemment, le modèle *ELSA* s'appuie sur un mélange liquide/gaz turbulent. Ainsi, une densité de mélange liquide/gaz est définie, à partir de la densité du liquide ρ_l , celle du gaz ρ_g et la fraction massique de liquide $\tilde{Y}_l$ qui sera définie au paragraphe 3.1.3.

$$\frac{1}{\bar{\rho}} = \frac{\tilde{Y}_l}{\rho_l} + \frac{1 - \tilde{Y}_l}{\rho_g} \quad (3.3)$$

Cette densité de mélange $\bar{\rho}$ peut être vue comme le barycentre entre les densités du liquide et du gaz, pondéré par la fraction volumique de liquide ϕ_l , définie ainsi :

$$\phi_l = \frac{\bar{\rho}\tilde{Y}_l}{\rho_l} \quad (3.4)$$

En effet, la relation 3.3 peut très bien être réécrite en fonction de la fraction volumique ϕ_l , comme suit :

$$\bar{\rho} = \phi_l \rho_l + (1 - \phi_l) \rho_g \quad (3.5)$$

Dans le but de développer le modèle *ELSA* dans des conditions réelles moteurs, les effets thermodynamiques sur les densités du liquide et du gaz sont pris en compte. La densité du liquide est déterminée à partir de tables en fonction de la température du liquide T_l alors que la densité du gaz est déterminée par la loi des gaz parfaits. La conservation de la masse s'exprime par la masse volumique moyenne, grâce à la relation suivante :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.6)$$

3.1.3 Transport de la fraction massique de liquide

La dispersion du jet liquide dans la chambre de combustion est pilotée par l'équation de transport suivante :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_l}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_l \tilde{u}_i}{\partial x_i} = - \frac{\partial \widetilde{\bar{\rho} u_i'' y_l''}}{\partial x_i} - \bar{\rho} \dot{\tilde{Y}}_{l,v} \quad (3.7)$$

Plusieurs précisions sont à faire ici : $\tilde{u}_i$ est la vitesse moyenne du mélange liquide/gaz, $\dot{\tilde{Y}}_{l,v}$ est un terme source qui modélise les effets de la vaporisation. Ce terme sera présenté plus en détail par la suite. Un dernier point reste à préciser : le flux turbulent de liquide $\widetilde{\bar{\rho} u_i'' y_l''}$ qui décrit la dispersion du liquide par la turbulence mais peut aussi être considéré comme un terme de glissement moyen entre les phases liquide et gaz (équation 3.40). Ce terme a déjà fait l'objet d'études approfondies par Beau [84], qui a repris une partie des travaux de Simonin [36] pour les adapter au modèle *ELSA*. Une nouvelle approche pour la fermeture de ce terme sera proposée dans le chapitre 5.

3.1.4 Conservation de la quantité de mouvement moyen

La notion de vitesse moyenne de mélange liquide/gaz a été introduite au paragraphe précédent. En effet, le modèle *ELSA* considérant l'ensemble des deux phases liquide et gaz comme un seul fluide à

masse volumique fortement variable, l'équation de transport de la vitesse moyenne de mélange s'écrit ainsi :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_j} = - \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} - \frac{\widetilde{\bar{\rho} u_i'' u_j''}}{\partial x_j} \quad (3.8)$$

Cette équation de transport correspond à un écoulement turbulent à masse volumique variable. En supposant un grand nombre de Reynolds, le tenseur de viscosité laminaire est négligé devant celui turbulent. Le tenseur de Reynolds $\widetilde{u_i'' u_j''}$ nécessite d'être étudié afin de comprendre si les fortes variations de masse volumique peuvent influencer le choix de sa fermeture.

3.1.5 Modélisation de la turbulence moyenne du mélange liquide/gaz

L'hypothèse de Boussinesq couplée à un modèle de turbulence à deux équations du type (k, ε) est proposée ici pour la fermeture du tenseur de Reynolds défini plus haut. C'est une approche classique qui consiste à écrire la relation suivante :

$$\widetilde{u_i'' u_j''} = -\nu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) + \frac{2}{3} \tilde{k} \delta_{ij} \quad (3.9)$$

$$\nu_t = C_\mu \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\varepsilon}} \quad (3.10)$$

$\tilde{k}$ est l'énergie cinétique turbulente moyenne du mélange liquide/gaz, $\tilde{\varepsilon}$ le taux de dissipation turbulent et ν_t la viscosité turbulente. C_μ est une constante de modélisation que les auteurs du modèle (k, ε) , à savoir Jones et Launder [87], fixent à $C_\mu = 0.09$. Demoulin *et al.* [88] ont étudié la perspicacité de choisir une approche turbulente en milieu monophasique pour décrire la turbulence d'écoulements liquide/gaz. Ils démontrent qu'avec une telle approche il est possible de retrouver les résultats expérimentaux de Stepowski [89] pour un processus d'atomisation dans une configuration de type injecteur coaxial aéronautique.

Avant d'écrire les équations de transport de l'énergie cinétique turbulente et de la dissipation turbulente du mélange liquide/gaz, il est nécessaire au préalable de s'intéresser à ce que contient chacune de ces deux grandeurs.

L'énergie cinétique turbulente moyenne du mélange liquide/gaz peut être exprimée comme la corrélation des fluctuations de vitesse :

$$\tilde{k} = \frac{1}{2} \widetilde{u_i'' u_i''} \quad (3.11)$$

or, si une décomposition par phase est effectuée, il est possible d'exprimer respectivement les énergies cinétiques turbulentes de la phase liquide et de la phase gazeuse $\bar{k}_l$ et $\bar{k}_g$ à l'aide des relations suivantes :

$$\bar{k}_l = \frac{1}{2} \overline{u'_{l,i} u'_{l,i}} \quad \text{et} \quad \bar{k}_g = \frac{1}{2} \overline{u'_{g,i} u'_{g,i}} \quad (3.12)$$

Il est possible de démontrer que l'énergie cinétique turbulente du mélange liquide/gaz est reliée aux deux précédentes par la relation suivante :

$$\tilde{k} = \tilde{Y}_l \bar{k}_l + (1 - \tilde{Y}_l) \bar{k}_g + \frac{\widetilde{u_i'' y_l''}^2}{2} \left(\frac{1}{\tilde{Y}_l} + \frac{1}{1 - \tilde{Y}_l} \right) \quad (3.13)$$

Les énergies cinétiques des deux phases sont donc reliées par le flux turbulent du liquide $\widetilde{u_i'' y_l''}$, qui caractérise le glissement entre les phases liquide et gazeuse. L'introduction de ce terme de glissement moyen dans la modélisation de l'énergie cinétique turbulente du mélange liquide/gaz $\widetilde{k}$ reste problématique et n'est pas prise en compte pour le moment (Beau [84]).

L'équation de transport modélisée de l'énergie cinétique turbulente moyenne du mélange liquide/gaz s'écrit de la façon suivante :

$$\frac{\partial \widetilde{\rho k}}{\partial t} + \frac{\partial \widetilde{\rho k} \widetilde{u}_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{Sc_{t,k}} \frac{\partial \widetilde{k}}{\partial x_i} \right) + \underbrace{\mu_t \left(\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{2}{3} \widetilde{\rho k} \frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_k}}_{P_k} - \widetilde{\rho \varepsilon} \quad (3.14)$$

avec un nombre de Schmidt pris égale à $Sc_{t,k} = 1$.

La dissipation turbulente moyenne du mélange liquide/gaz est définie de la façon suivante :

$$\widetilde{\varepsilon} = 2\nu \frac{\overline{\partial u_i''}{\partial x_j} \frac{\partial u_i''}{\partial x_j}}{\quad} \quad (3.15)$$

or, il est tout à fait possible de faire une démarche analogue à celle proposée au paragraphe précédent pour l'énergie cinétique turbulente du mélange, à savoir, décomposer le taux de dissipation en un taux de dissipation turbulente de la phase liquide $\widetilde{\varepsilon}_l$ et un pour la phase gazeuse $\widetilde{\varepsilon}_g$, définis comme suit :

$$\widetilde{\varepsilon}_l = 2\nu \frac{\overline{\partial u_{l,i}'}}{\partial x_j} \frac{\partial u_{l,i}'}{\partial x_j} \quad \text{et} \quad \widetilde{\varepsilon}_g = 2\nu \frac{\overline{\partial u_{g,i}'}}{\partial x_j} \frac{\partial u_{g,i}'}{\partial x_j} \quad (3.16)$$

Le taux de dissipation turbulente moyen du mélange liquide/gaz $\widetilde{\varepsilon}$ peut être relié aux deux précédents par la relation suivante :

$$\widetilde{\varepsilon} = \widetilde{Y}_l \widetilde{\varepsilon}_l + (1 - \widetilde{Y}_l) \widetilde{\varepsilon}_g + \frac{2\nu}{\widetilde{\rho}} \frac{\partial \widetilde{\rho u_i'' y_l''}}{\partial x_j} \frac{\partial \widetilde{\rho u_i'' y_l''}}{\partial x_j} \left(\frac{1}{\widetilde{Y}_l} + \frac{1}{1 - \widetilde{Y}_l} \right) \quad (3.17)$$

La même constatation que pour l'énergie cinétique turbulente du mélange est possible ici : les taux de dissipation turbulente sont reliés entre eux par le flux turbulent du liquide $\widetilde{u_i'' y_l''}$. Ainsi, la dissipation du mélange liquide/gaz peut être vue comme étant la somme des dissipations des phases liquide et gazeuse et la dissipation liée aux interactions entre ces deux phases. De la même façon que pour l'énergie cinétique turbulente moyenne du mélange liquide/gaz, le glissement moyen n'est pas pris en compte pour l'équation de transport de la dissipation turbulente moyenne du mélange liquide/gaz.

Son équation de transport modélisée s'écrit ainsi :

$$\frac{\partial \widetilde{\rho \varepsilon}}{\partial t} + \frac{\partial \widetilde{\rho \varepsilon} \widetilde{u}_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{Sc_{t,\varepsilon}} \frac{\partial \widetilde{\varepsilon}}{\partial x_i} \right) + C_{\varepsilon,1} \widetilde{\rho} P_k \frac{\widetilde{\varepsilon}}{\widetilde{k}} - C_{\varepsilon,2} \widetilde{\rho} \frac{\widetilde{\varepsilon}^2}{\widetilde{k}} + C_{\varepsilon,3} \widetilde{\rho \varepsilon} \frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_k} \quad (3.18)$$

avec un nombre de Schmidt pris égale à $Sc_{t,\varepsilon} = 1.22$ et P_k le terme de production d'énergie cinétique turbulente (équation 3.14).

Trois constantes de modélisation sont présentes dans cette équation, leur valeur respective est fixée par Jones et Launder [87] : $C_{\varepsilon,1} = 1.44$, $C_{\varepsilon,2} = 0.33$ et $C_{\varepsilon,3} = 1.92$.

3.2 Transport de la densité d'interface liquide/gaz

Etant un modèle d'atomisation, le modèle *ELSA* doit prédire l'évolution de l'écoulement en aval de l'injecteur et en particulier la taille des paquets liquides puis des gouttes liquides qui constitueront la phase dispersée du spray. Vallet *et al.* [79, 80] introduisent pour la première fois en 2001 une équation de transport de la densité moyenne d'interface liquide/gaz par unité de volume $\bar{\Sigma}$ dans le but de considérer une notion plus générale que le diamètre des gouttes. Par définition, une densité d'interface liquide/gaz n'impose pas de façon intrinsèque la sphéricité des paquets liquides, *a contrario* du diamètre. De même, elle ne suppose pas que le liquide soit sous forme de paquets liquides détachés. Ces hypothèses de sphéricité des paquets liquides ne sont pas réalistes en zone dense de spray, près du nez de l'injecteur. Dans cette optique, ce modèle pour l'équation d'interface liquide/gaz s'appuie sur une analogie avec l'équation de transport de surface de flamme initialement introduite par Marble [90].

L'équation de transport de la densité d'interface liquide/gaz s'écrit :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\Omega}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{\Omega}}{\partial x_j} = - \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i'' \omega''}{\partial x_i} + \sum_i \bar{\rho} \dot{\tilde{\Omega}}_i \quad (3.19)$$

avec, par commodité de calcul :

$$\bar{\Sigma} = \bar{\rho} \tilde{\Omega} \quad (3.20)$$

En effet, la majorité des codes de *CFD* actuels transportent des grandeurs massiques. Il est donc nécessaire de définir une densité massique moyenne d'interface liquide/gaz $\tilde{\Omega}$.

Les termes source $\bar{\rho} \dot{\tilde{\Omega}}_i$ sont choisis pour prendre en compte les différents phénomènes physiques rencontrés. Le détail des termes choisis pour cette étude sera présenté au chapitre 4. Néanmoins, les phénomènes physiques potentiellement observables dans des configurations de type “jets haute pression Diesel ou essence” sont présentés ici, à titre introductif.

Comme il a été vu précédemment, il paraît nécessaire de ne pas considérer dès la sortie de l'injecteur que le liquide est sous forme de gouttes sphériques. Dans la mesure du possible, cette hypothèse doit donc être évitée pour les termes source de l'équation de transport d'interface. Cependant, quand le spray devient dilué, l'aspect sphérique des gouttes est retrouvé et les termes source doivent évoluer pour correspondre à ces cas limites.

Création d'interface liquide/gaz à la sortie de l'injecteur : la topologie de l'écoulement change radicalement entre le moment où le liquide circule dans l'injecteur et le moment où il sort de la buse. En amont des lèvres de l'injecteur, il n'existe pas d'interface entre les phases liquide et gaz (hormis pour les injecteurs cavitants). Ce n'est que lorsque le jet entre dans la chambre de combustion que la surface de contact entre ces deux phases apparaît. D'un point de vue pratique, cette création d'interface liquide/gaz sera modélisée par un terme d'initialisation.

Création d'interface liquide/gaz due aux instabilités : comme il a été vu précédemment au chapitre 1, le phénomène d'instabilités liquide/gaz joue un rôle prépondérant à faibles nombres de

Weber et de Reynolds, lorsque les forces de tension de surface sont importantes et que la turbulence est faiblement développée. Lors du développement de ces instabilités, la quantité d'interface entre les phases liquide et gaz croît. Cependant, dans des cas de type Diesel, ce phénomène ne sera pas considéré explicitement et sera intégré dans un terme de création par turbulence.

Création d'interface liquide/gaz due à l'étirement moyen du jet par turbulence : il s'agit ici de prendre en compte les effets des structures moyennes et turbulentes présentes dans la chambre de combustion sur le développement du jet. La principale observation qui en résulte est un plissement au niveau du jet.

Création d'interface liquide/gaz due aux phénomènes de rupture secondaire : ce phénomène est très souvent observé en phase dispersée du spray. Lorsque la différence de vitesse entre les phases liquide et gaz est importante, les paquets liquides subissent l'effet de forces aérodynamiques importantes. Plusieurs régimes de ruptures sont possibles, ils ont été présentés en détail au chapitre 2 (cf figure 2.4). Certains de ces modèles peuvent être directement adaptés.

Création d'interface liquide/gaz due à la présence de collisions entre gouttes : à masse égale, lorsque des gouttes collisionnent, elles peuvent dans certaines conditions donner un nombre plus important qu'à l'initial de gouttes. Il y a alors création d'interface liquide/gaz par unité de masse. Le cas de deux gouttes qui collisionnent a été étudié par exemple par Tanguy [91] à l'aide de simulations numériques directes. Le résultat est présenté en figure 3.2 et montre la création de surface de contact liquide/gaz lors d'une collision entre deux gouttes.

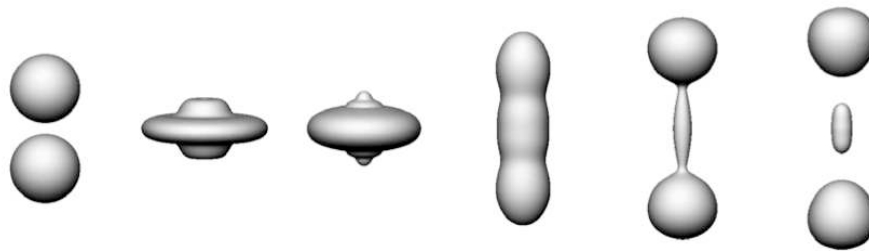


FIG. 3.2 – Etude numérique proposée par Tanguy [91] sur la collision de deux gouttes identiques avec un nombre de Weber $We = 40$

Diminution de l'interface liquide/gaz due à la coalescence entre gouttes : c'est l'autre possibilité lorsque des paquets liquides se rencontrent. A masse égale, lorsque deux paquets liquides coalescent en un, une diminution de la densité massique d'interface liquide/gaz est observée. Tanguy propose également dans sa thèse [91] une étude du régime de coalescence, illustrant la diminution d'interface :

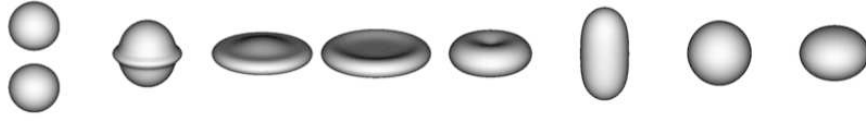


FIG. 3.3 – Etude numérique proposée par Tanguy [91] sur la coalescence de deux gouttes identiques avec un nombre de Weber $We = 130$ et un nombre d'Ohnesorge $Oh = 0.177$

Diminution de l'interface liquide/gaz due au phénomène d'évaporation du liquide : en effet, l'évaporation de la phase liquide peut être considérée comme une diminution de densité moyenne d'interface liquide/gaz. Toujours à l'aide de l'outil de DNS développé durant sa thèse, Tanguy présente également une étude sur l'évaporation d'une goutte en mouvement (figure 3.4).

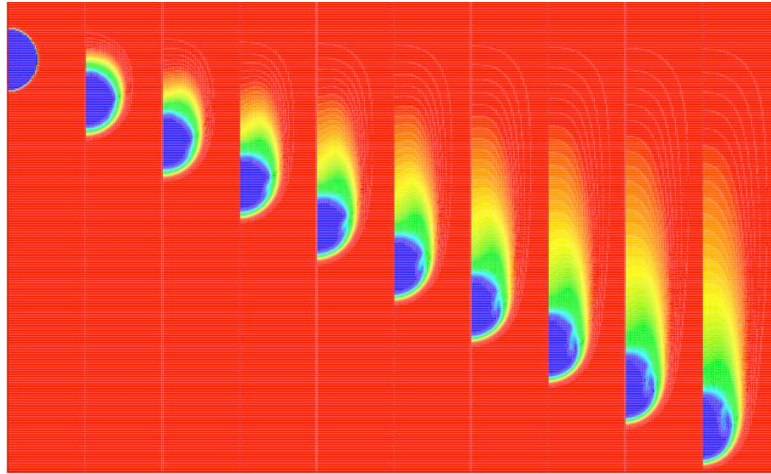


FIG. 3.4 – Etude numérique proposée par Tanguy [91] sur l'évaporation d'une goutte liquide en mouvement - champ de valeurs de température

Différents auteurs se sont intéressés à la modélisation de chacun de ces phénomènes physiques, ainsi qu'à leur intégration dans l'équation de transport de la densité d'interface liquide/gaz. Une revue plus détaillée de ces approches est proposée au chapitre 4. De cette revue bibliographique, une équation de transport de l'interface liquide/gaz sera également proposée.

3.3 Les échanges thermique et massique avec le gaz environnant

3.3.1 Modélisation de la dispersion du carburant évaporé

Une fois évaporé, la dispersion de la vapeur de carburant dans la chambre de combustion est pilotée par l'équation de transport 3.21.

$$\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{Y}_v}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{Y}_v \tilde{u}_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{Sc_t} \frac{\partial \tilde{Y}_v}{\partial x_j} \right) + \tilde{\rho} \tilde{\dot{Y}}_{l,v} \quad (3.21)$$

Une loi de Fick (ou loi gradient) est adoptée pour modéliser le terme de diffusion turbulente avec un nombre de Schmidt $Sc_t = 1$.

Le terme source de vaporisation $\bar{\rho}\dot{\tilde{Y}}_{l,v}$ est modélisé à l'aide d'un taux de vaporisation par unité de surface évalué à partir de l'approche d'Abramzon et Sirignano [61, 62]. Cette approche permet de calculer un taux de vaporisation qui a pour unité le " kg/s ". Or, pour l'adapter à une formulation eulérienne telle que le nécessite le modèle *ELSA*, ce taux de vaporisation doit être exprimé par unité de surface. Ayant été initialement prévu "par goutte", il sera divisé par la surface de la goutte :

$$\dot{m}_{v,ELSA} = \frac{\dot{m}_{vap}}{\pi D_d^2} \quad (3.22)$$

Finalement, le terme source $\bar{\rho}\dot{\tilde{Y}}_{l,v}$ commun aux équations de transport 3.7 et 3.21 s'exprime de la façon suivante, en faisant intervenir la densité moyenne d'interface liquide/gaz :

$$\bar{\rho}\dot{\tilde{Y}}_{l,v} = \bar{\rho}\dot{m}_{v,ELSA}\tilde{\Omega} \quad (3.23)$$

3.3.2 Transport de l'enthalpie massique du liquide

Une enthalpie moyenne du mélange liquide/gaz est considérée mais il n'est cependant pas raisonnable de supposer l'équilibre thermique entre le liquide et le gaz. Il est donc nécessaire d'introduire une équation de transport pour l'enthalpie massique moyenne du liquide.

Le taux de vaporisation nécessaire au calcul du terme source $\bar{\rho}\dot{\tilde{Y}}_{l,v}$ des équations 3.7 et 3.21 nécessite le calcul préalable d'une température pour la phase liquide, notamment pour le calcul des paramètres de transfert de masse et de chaleur B_M et B_T , déterminés respectivement à l'aide des relations 2.29 et 2.30.

Une équation de transport de l'enthalpie massique du liquide $\tilde{h}_l$ est ainsi proposée :

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{Y}_l\tilde{h}_l}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho}\tilde{Y}_l\tilde{h}_l\tilde{u}_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial \tilde{Y}_l\tilde{h}_l}{\partial x_j} \right) + \bar{\rho}\dot{\tilde{Y}}_l\tilde{h}_l \quad (3.24)$$

avec un nombre adimensionnel de Prandtl $Pr_t = 1$. Le terme source $\bar{\rho}\dot{\tilde{Y}}_l\tilde{h}_l$ caractérise les effets de réchauffement ou de refroidissement du liquide en présence d'un gaz environnant respectivement plus chaud ou plus froid mais aussi les effets de refroidissement du liquide lors du changement d'état (vaporisation du liquide). Il s'exprime donc de la façon suivante, en fonction du taux de vaporisation par unité de surface $\dot{m}_{v,ELSA}$:

$$\bar{\rho}\dot{\tilde{Y}}_l\tilde{h}_l = \bar{\rho}\tilde{Y}_l\frac{Q_L}{m_d} - \bar{\rho}\dot{m}_{v,ELSA}\tilde{\Omega}\tilde{h}_l = \frac{\bar{\rho}Q_L\rho_l^2\tilde{\Omega}^3}{36\pi\tilde{Y}_l^2} - \bar{\rho}\dot{m}_{v,ELSA}\tilde{\Omega}\tilde{h}_l \quad (3.25)$$

avec Q_L la quantité de chaleur reçue par la goutte de masse m_d .

3.3.3 Implémentation du modèle *ELSA* dans le code AVL Fire

Cette section est plus spécifiquement dédiée à l'implémentation du modèle *ELSA* tel qu'il a été développé durant cette étude dans le logiciel de *CFD* utilisé par PSA Peugeot Citroën, à savoir le code

AVL Fire. Cette implémentation passe par l'ajout d'un certain nombre de “*user-subroutines*” mais aussi par des modifications de certaines “*subroutines*” source du code. Il ne s'agit pas ici de rentrer dans les détails de l'organigramme du code *ELSA* dans sa version AVL Fire mais plutôt de développer un point sensible rencontré durant cette étude, à savoir les modifications qui ont été apportées au niveau de l'algorithme du solveur “*SIMPLE*” (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*) [92, 93, 94] utilisé par AVL Fire.

3.3.3.1 Modification de l'équation de transport de l'enthalpie sensible du gaz

Il est tout d'abord nécessaire de modifier l'équation de transport de l'enthalpie sensible du gaz du code AVL Fire afin qu'elle prenne en compte la présence de liquide dans le domaine de calcul. Deux méthodes sont possibles :

- modifier les conditions limites en sortie d'injecteur (là où la fraction massique de liquide est égale à 1) ;
- transformer l'équation pour qu'elle transporte non plus l'enthalpie sensible du gaz mais l'enthalpie du mélange liquide/gaz ;

C'est cette seconde méthode qui a été adoptée ici car la première entraîne des instabilités numériques dramatiques en zone dense de spray, là où le liquide est en proportion importante et où donc une baisse conséquente de la température issue de cette enthalpie est observée. Il s'agit donc de définir une enthalpie de mélange massique liquide/gaz $\tilde{h}_{mix}$:

$$\tilde{h}_{mix} = \tilde{Y}_l \tilde{h}_l + (1 - \tilde{Y}_l) \tilde{h}_g \quad (3.26)$$

En considérant une capacité calorifique moyenne définie telle que :

$$\overline{C}_p(T) = \frac{1}{T} \int_{T_{ref}}^T C_p(T) dT \quad (3.27)$$

il est possible d'exprimer l'enthalpie de mélange en fonction des capacités calorifiques des phases considérées ici :

$$\tilde{h}_{mix} = \tilde{Y}_l \overline{C}_{p,l}(T_l) \tilde{T}_l + (1 - \tilde{Y}_l) \overline{C}_{p,g}(T_g) \tilde{T}_g \quad (3.28)$$

En dernière étape, il reste à factoriser la température du gaz, afin d'exprimer l'enthalpie du mélange de la forme $\tilde{h}_{mix} = \overline{C}_{p,mix} \tilde{T}_g$:

$$\tilde{h}_{mix} = \left(\tilde{Y}_l \overline{C}_{p,l}(T_l) \frac{\tilde{T}_l}{\tilde{T}_g} + (1 - \tilde{Y}_l) \overline{C}_{p,g}(T_g) \right) \tilde{T}_g \quad (3.29)$$

Ce qui nous donne finalement une capacité calorifique du mélange liquide/gaz :

$$\overline{C}_{p,mix} = \tilde{Y}_l \overline{C}_{p,l}(T_l) \frac{\tilde{T}_l}{\tilde{T}_g} + (1 - \tilde{Y}_l) \overline{C}_{p,g}(T_g) \quad (3.30)$$

Cette méthode “atypique” de modification de la capacité calorifique permet la prise en compte de l'enthalpie moyenne tout en gardant la méthode de calcul de la température du gaz. En effet, pour

les calculs d'échanges thermiques entre les deux phases liquide et gaz (vaporisation et par la suite, combustion), il est nécessaire de conserver cette méthode de calcul de température du gaz. Cette solution a été choisie en concertation avec l'équipe de développement d'AVL Fire afin d'assurer une certaine stabilité numérique, critère qui a toujours été mis en avant, dans le but d'utiliser le modèle *ELSA* sans restrictions, dans des configurations diverses.

Une fois cette modification effectuée, le solveur d'AVL Fire transporte désormais une enthalpie massique de mélange liquide/gaz mais qui renvoie une température du gaz. Il reste alors à traiter le problème du terme source modélisant les effets d'évaporation du carburant sur l'enthalpie du mélange. Initialement, si l'on ne modifie pas l'équation de transport de l'enthalpie sensible du code Fire, un terme source modélisant les échanges thermique et massique est introduit. Ici, avec une enthalpie de mélange liquide/gaz, la modélisation des échanges thermiques n'a plus lieu d'être. En effet, ce qui est perdu par le liquide sera donné au gaz et *vice versa* donc l'enthalpie de mélange de ces deux phases s'en trouvera inchangée. Par contre, il reste tout de même le terme source suivant, qui fait intervenir la chaleur latente de vaporisation L_v du carburant considéré à la température de référence T_{ref} :

$$\dot{\hat{h}}_{mix} = -\dot{m}_{v,ELSA} L_{v,T_{ref}} \quad (3.31)$$

Cette modification est apportée par l'ajout d'un terme source *via* une formulation explicite.

3.3.3.2 Implication partielle des termes source

Afin d'obtenir une bonne stabilité numérique et de relâcher le critère sur le pas de temps de calcul comme celui de Courant - Friedrichs - Lewy (CFL), il a été décidé d'impliciter le maximum de termes source pour les différentes équations de transport introduites par le modèle *ELSA*. Selon Patankar [95], l'intégration des termes source dans le code AVL Fire passe par une écriture sous la forme générique $A - B * [X]$, X étant le scalaire transporté. Cette écriture qui différencie les termes explicites A des termes implicites B permet une inversion de matrice et donc une résolution numérique plus efficace.

Les termes source de l'équation de transport de la densité d'interface liquide/gaz (cf chapitre 4) se prêtent bien à ce type d'écriture. Il s'agit ici de s'intéresser plus particulièrement aux équations de transport pour la fraction massique de liquide Y_l , la fraction massique de carburant vapeur Y_v et l'enthalpie massique du liquide h_l .

Pour la vaporisation en zone dense, l'inertie thermique du gaz est très faible et un régime de saturation en vapeur est très rapidement atteint. Dans le but d'éviter des limitations trop fortes sur le pas de temps de calcul, il est nécessaire de s'intéresser à une méthode implicite et de déterminer un état final de vaporisation. Il est en effet tout à fait possible de réécrire formellement chaque terme source sous la forme :

$$\dot{\hat{X}} = \frac{[\tilde{X}]_{final} - [\tilde{X}]}{\tau} \quad (3.32)$$

avec τ un temps de rappel vers ce régime final.

En raisonnant ainsi, chaque terme source peut donc s'écrire :

$$\dot{\tilde{X}} = \frac{\dot{\tilde{X}} [\tilde{X}]_{final}}{\underbrace{[\tilde{X}]_{final} - [\tilde{X}]}_A} - \frac{\dot{\tilde{X}}}{\underbrace{[\tilde{X}]_{final} - [\tilde{X}]}_B} [\tilde{X}] \quad (3.33)$$

et ainsi obtenir la forme voulue. La seule inconnue est le régime final de vaporisation. Pour ce faire, à chaque pas de temps et dans chaque cellule, un bilan est effectué pour le déterminer. La démarche est présentée ci-dessous.

Soit $m_{v,final}$ la masse maximum possible de carburant évaporé :

$$\tilde{Y}_{l,final} = \tilde{Y}_l - m_{v,final} \quad (3.34)$$

$$\tilde{Y}_{v,final} = \tilde{Y}_v + m_{v,final} \quad (3.35)$$

En sommant les équations (3.34) et (3.35), la première équation du système à résoudre est obtenue :

$$\tilde{Y}_{v,final} + \tilde{Y}_{l,final} = \tilde{Y}_v + \tilde{Y}_l \quad (3.36)$$

En posant l'hypothèse d'une variation de vitesse de mélange nulle lors du passage de l'état initial à l'état final, l'enthalpie sensible initiale s'exprime ainsi :

$$\tilde{h}_{initial}^s = \tilde{Y}_l \tilde{h}_l^s(T_l) + \tilde{Y}_v \tilde{h}_v^s(T_g) + \tilde{Y}_g \tilde{h}_g^s(T_g) \quad (3.37)$$

avec “ l ” l'indice se référant à la phase liquide, “ g ” celui se référant à la phase gazeuse à l'exception de la vapeur de carburant et “ v ” celui se référant à la vapeur de carburant.

De la même façon, on peut décrire l'état final ainsi :

$$\begin{aligned} \tilde{h}_{final}^s &= \tilde{Y}_{l,final} \tilde{h}_{l,final}^s(T_{final}) + \tilde{Y}_{v,final} \tilde{h}_{v,final}^s(T_{final}) \\ &+ \tilde{Y}_{g,final} \tilde{h}_{g,final}^s(T_{final}) \end{aligned} \quad (3.38)$$

On obtient alors la température finale T_{final} par conservation de l'énergie totale :

$$T_{final} = \frac{\tilde{h}_{initial}^s - m_{v,final} L_v}{\tilde{Y}_{l,final} \bar{C}_{p,l}(T_{final}) + \tilde{Y}_{v,final} \bar{C}_{p,v}(T_{final}) + \tilde{Y}_{g,final} \bar{C}_{p,g}(T_{final})} \quad (3.39)$$

avec $L_v = (h_v^0 - h_l^0)$ la chaleur latente de vaporisation.

L'algorithme de convergence suivant permet d'obtenir l'état final :

- Première itération, supposition de la valeur de T_{final} à $T_{final}^* = T_l$
- Calcul de la fraction massique de vapeur saturante $Y_{v,s}$ à l'aide de la relation de Clapeyron ;
- Comparaison de $Y_{v,s}$ et $\tilde{Y}_v + \tilde{Y}_l$;
 - Si $Y_{v,s} > \tilde{Y}_v + \tilde{Y}_l$ alors tout le liquide est évaporé : $\tilde{Y}_{l,final} = 0$ et $\tilde{Y}_{v,final} = \tilde{Y}_v + \tilde{Y}_l$;
 - Si $Y_{v,s} < \tilde{Y}_v + \tilde{Y}_l$ alors le régime de saturation est atteint : $\tilde{Y}_{v,final} = Y_{v,s}$ et $\tilde{Y}_{l,final} = \tilde{Y}_v + \tilde{Y}_l - Y_{v,s}$.

- Calcul de la nouvelle température d'équilibre T_{final} à l'aide de la relation 3.39.
- Comparaison de T_{final}^* et T_{final} et réitérer si la convergence n'est pas atteinte.

Cette recherche de régime maximal de vaporisation permet d'obtenir les trois états finaux $\left[\tilde{X}\right]_{final}$ pour les trois équations de transport de Y_l , Y_v et h_l . Les termes source peuvent donc être écrits suivant la forme présentée à l'équation 3.33. L'implication d'une partie des termes source permet au solveur de converger plus lentement mais de façon plus sûre, suivant un comportement asymptotique vers ce régime final, sans jamais le dépasser. Cela évite ainsi des situations de cas non physiques qui pourraient déstabiliser le code, toutes les équations du modèle *ELSA* étant liées entre elles par le taux de vaporisation par unité de surface $\dot{m}_{v,ELSA}$.

3.4 Contribution de l'approche lagrangienne dans le modèle

Il s'agit en fait de s'intéresser ici à la fermeture du terme de diffusion des équations de transport de la fraction massique de liquide et de la densité d'interface liquide/gaz. En se référant aux relations exactes suivantes, évoquées par Beau *et al.* [84, 85] :

$$\widetilde{u_i'' y_l''} = \tilde{Y}_l (1 - \tilde{Y}_l) (\overline{u_{\tilde{X},i}|_l} - \overline{u_i|_g}) = \tilde{Y}_l (\overline{u_{\tilde{X},i}|_l} - \tilde{u}_i) \quad (3.40)$$

$$\widetilde{u_i'' \omega''} = \tilde{\Omega} (1 - \tilde{\Omega}) (\overline{u_{\tilde{\Omega},i}|_l} - \overline{u_i|_g}) = \tilde{\Omega} (\overline{u_{\tilde{\Omega},i}|_l} - \tilde{u}_i) \quad (3.41)$$

il est tout à fait possible de considérer ces termes de flux turbulent $\widetilde{u_i'' x''}$ comme étant des termes de glissement entre phases. En effet, ces relations exactes 3.40 et 3.41 mettent en évidence un différentiel de vitesse liquide/gaz, $\overline{u_{\tilde{X},i}|_l}$ et $\overline{u_i|_g}$ étant respectivement les vitesses d'advection du scalaire $\tilde{X}$, conditionnées par les phases liquide et gaz. Or, Beau met en évidence dans son étude qu'une fermeture au premier ordre, du type "loi de Fick" ou "loi gradient" peut s'avérer insuffisante pour représenter ce lien très fort qui existe entre le flux turbulent et le différentiel de vitesse entre phases.

S'inspirant de la littérature, Beau *et al.* [84, 85] propose un jeu de trois équations de transport du flux $\widetilde{u_i'' y_l''}$. Il introduit alors la notion de traînée, jusqu'à présent absente du formalisme *ELSA* et qui traduit donc une différence de comportement de la phase liquide en fonction du diamètre moyen de Sauter D_{32} .

Il reste cependant un facteur limitant : le fait qu'il n'y ait qu'un seul diamètre qui soit transporté et non une fonction de densité de probabilité (*PDF*). C'est dans cette optique que s'inscrit la méthode proposée ici. Il s'agit en fait d'utiliser une approche lagrangienne, transportant un certain nombre de gouttes pour ainsi obtenir une *PDF* de taille de gouttes et donc, via la loi de traînée, une *PDF* de vitesses. Un couplage entre le formalisme eulérien présenté dans ce chapitre et cette approche lagrangienne est donc effectué au niveau des termes de diffusion turbulente, à l'aide des relations exactes 3.40 et 3.41. L'ensemble de cette méthode de couplage Euler - Lagrange est abordé de façon exhaustive au chapitre 5.

Chapitre 4

Modélisation du transport de la densité d'interface liquide/gaz

Le but initial de l'atomisation d'un jet liquide est d'augmenter la quantité d'interface entre la phase liquide et la phase gaz. En effet, c'est cette quantité d'interface liquide/gaz qui pilote directement les échanges thermique et massique ainsi que le transfert de quantité de mouvement et d'énergie.

Comme souligné précédemment, face aux observations expérimentales près de l'injecteur, il devient difficile de continuer à raisonner en diamètre, de poser l'hypothèse qu'en sortie de buse, les paquets liquides issus de l'atomisation soient déjà sphériques et parfaitement détachés les uns des autres.

Initialement proposée par Ishii [96, 97] en 1975, la notion d'aire interfaciale permet donc de mieux décrire la topologie de l'écoulement.

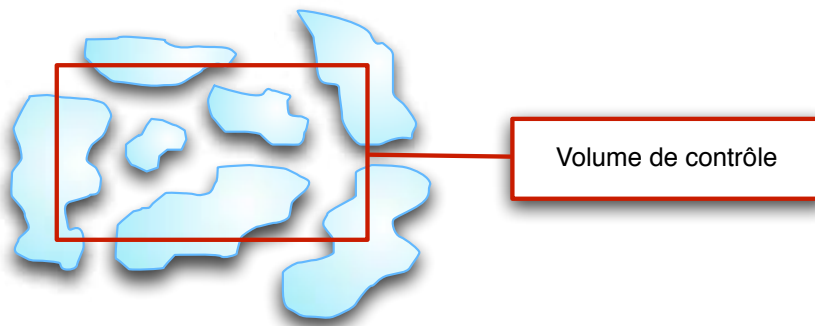


FIG. 4.1 – Représentation schématique de l'aire interfaciale et de la densité d'interface

L'aire interfaciale représente la surface bleutée à l'intérieur du volume de contrôle (figure 4.1) et s'exprime en m^2 . La densité d'interface correspond à l'aire interfaciale par unité de volume et s'exprime donc en $m^2/m^3 = m^{-1}$.

4.1 Construction de l'équation de transport de la densité d'interface liquide/gaz

4.1.1 Transport d'interface réactive : surface de flamme

En combustion, la densité de surface de flamme caractérise les transferts de masse, de quantité de mouvement et d'énergie entre la zone des réactifs et celle des espèces ayant déjà réagi. Cette notion de densité de surface de flamme est désormais un point clé de la modélisation de la combustion et a été initialement proposée par Marble et Broadwell [90]. Cette approche a donné le modèle “CFM” pour *Coherent Flame Model*. La flamme peut alors être caractérisée par la vitesse de flamme laminaire ainsi que son étirement. Le taux de réaction chimique moyen se calcule alors comme le produit de la densité d'interface par la vitesse de flamme laminaire S_L .

L'analogie avec l'interface liquide/gaz se fait donc naturellement. En diphasique, la densité de surface de liquide par unité de volume caractérise aussi les échanges thermique et massique (évaporation) ainsi que le transfert de quantité de mouvement (loi de traînée) entre les phases liquide et gaz.

4.1.1.1 Equation exacte de transport d'interface réactive

Parmi les nombreux travaux à ce sujet, Candel [98] parvient en 1990 à dériver une équation exacte de transport de la densité de surface de flamme. Il obtient l'équation suivante :

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (U_i + S_L n_i) \Sigma = \left[(v_i v_j + \eta_i \eta_j) \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \right] \Sigma + S_L \Sigma \frac{\partial n_i}{\partial x_i} \quad (4.1)$$

Avec v_i et η_i les vecteurs définissant le plan tangent à la surface de la flamme, n_i le vecteur normal à la surface de la flamme et S_L la vitesse de flamme laminaire (ou vitesse de réaction de combustion).

De gauche à droite, l'équation 4.1 est constituée d'un terme de variation temporelle, un terme d'advection par la vitesse de l'écoulement et la vitesse de flamme laminaire, un terme prenant en compte l'effet de l'étirement dans le plan tangent à la surface de la flamme et un dernier terme lié à l'interaction de la vitesse de réaction S_L avec la densité de surface de flamme.

4.1.1.2 Modélisation de l'équation de transport de la densité moyenne de surface de flamme

Il s'agit ici de présenter une modélisation de l'équation de transport de la densité moyenne de surface de flamme basée sur une approche phénoménologique. Cette modélisation est proposée par Duclos en 1993 [99]. D'une manière générale, l'équation de transport s'écrit de la façon suivante :

$$\frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_i \bar{\Sigma}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\nu_t}{Sc_t} \frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial x_i} \right) + A_{i,j} \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \bar{\Sigma} + A_1 \frac{\bar{\varepsilon}}{\bar{k}} \bar{\Sigma} - A_2 \bar{\Sigma}^2 \quad (4.2)$$

$A_{i,j}$, A_1 et A_2 étant des fonctions qui diffèrent selon les auteurs.

Marble [90] propose par exemple $A_{i,j} = C_{ste}$, $A_1 = 0$ et $A_2 = C_{ste} S_L / (1 - \bar{C})$, $\bar{C}$ étant la variable d'avancement moyenne.

Hormis les termes classiques de variation temporelle et d'advection par la vitesse moyenne du membre de gauche, il est nécessaire de décrire les phénomènes physiques représentés par les termes du membre de droite de l'équation 4.2. De gauche à droite donc :

- la diffusion turbulente de la densité de surface de flamme, modélisée par une loi gradient ;
- l'étirement moyen, modélisé par l'action des gradients de vitesse moyenne sur la surface de la flamme ;
- l'étirement turbulent, modélisé par l'action de la turbulence sur la surface de flamme (terme source proportionnel à l'inverse d'un temps turbulent) ;
- l'effet de la réaction de combustion sur la surface de la flamme, la densité de surface de flamme étant limitée à petite échelle : en effet, d'un côté, les petits paquets de gaz frais disparaissent avec leur interface lorsqu'ils sont brûlés, de l'autre, la densité de surface de flamme croît lors de la propagation de la flamme depuis un ensemble de plusieurs poches de gaz brûlé.

En analysant les phénomènes physiques représentés par ces termes source, quelques similarités comme le plissement turbulent ou le plissement moyen ainsi que les instabilités de couche de cisaillement permettent de proposer une analogie de comportement entre les paquets de gaz frais en combustion et les paquets liquides en diphasique.

Cependant, les mécanismes de production et de destruction, que ce soit d'un côté pour les poches de gaz frais, de l'autre pour les paquets liquides, diffèrent. Dans le cas de la combustion, la densité de flamme est limitée par la diffusion laminaire des espèces et la combustion (effet pris en compte par la vitesse laminaire de flamme). Dans le cas d'un mélange diphasique liquide/gaz, la densité d'interface liquide/gaz est limitée par la tension de surface et le phénomène de vaporisation. Les masses volumiques très différentes entre les phases liquide et gaz font aussi apparaître des instabilités spécifiques : celle de Darius - Landau pour les flammes, celles de Rayleigh ou Rayleigh - Taylor [32] pour les mélanges liquide/gaz.

4.1.2 Transport de la densité d'interface liquide/gaz

Deux approches sont possibles pour établir une équation de transport pour l'interface liquide/gaz : considérer l'écoulement liquide comme une phase dispersée ou non. En d'autres termes, raisonner en gouttes sphériques détachées les unes des autres (et donc en diamètre de goutte) ou de façon plus générale, en quantité de surface de contact entre les phases liquide et gaz.

4.1.2.1 Adaptation des lois d'évolution de gouttes

Sont considérées ici les équations de transport de surface de liquide fermées à l'aide de lois d'évolution de gouttes (modèles de rupture primaire, de rupture secondaire, de collision/coalescence et d'évaporation). L'évolution de la quantité de mouvement (*i.e.* la vitesse de la goutte) n'est pas traitée ici car elle ne modifie pas directement le comportement de la densité d'interface liquide/gaz. Cependant, elle joue un rôle dans la vitesse moyenne retenue pour l'advection de la densité d'interface liquide/gaz.

De façon générale, il est possible de passer d'une loi d'évolution d'un diamètre de goutte à un terme source pour l'équation de transport de la densité d'interface liquide/gaz à l'aide la relation suivante, en supposant que le nombre de gouttes par unité de volume N_d est constant :

$$\dot{\bar{\Sigma}} = \frac{dN_d S_d}{dt} = \pi N_d \frac{dD_d^2}{dt} = 2\pi N_d D_d \frac{dD_d}{dt} \quad (4.3)$$

S_d étant la surface de la goutte et $\bar{\Sigma}$ la densité d'interface liquide/gaz.

Modélisation proposée par Wan [37] Cette étude proposée par Wan et Peters en 1999 se base sur des modèles lagrangiens de vaporisation et de rupture. Les effets de collision et de coalescence ne sont pas traités ici. En ce qui concerne les lois d'évolution qui sont à la base de cette modélisation, une loi du D^2 est utilisée pour la vaporisation ainsi que le modèle de Reitz et Diwakar [73] pour les phénomènes de rupture secondaire que subissent les gouttes dans l'écoulement. Les auteurs obtiennent ainsi une équation de transport fermée du carré du diamètre moyen des gouttes liquides :

$$\frac{\partial \rho_l \bar{Y}_l D_d^2}{\partial t} + \frac{\partial \rho_l \bar{u}_{l,i} \bar{Y}_l D_d^2}{\partial x_i} = -\phi_{vaporisation} - \phi_{breakup} \quad (4.4)$$

D_d étant le diamètre des gouttes, $\bar{Y}_l$ la fraction volumique de liquide et $\bar{u}_{l,i}$ la vitesse du liquide. Les deux termes source du membre de droite de cette équation modélisent respectivement la vaporisation et le breakup secondaire.

Dans cette approche, il existe plusieurs limitations :

- le choix de transporter un diamètre moyen au carré plutôt qu'une interface liquide/gaz ne permet pas une généralisation de cette équation en zone dense de spray, près du nez de l'injecteur, le diamètre caractérisant par définition un objet sphérique ;
- l'utilisation du modèle de rupture secondaire développé par Reitz et Diwakar est intéressante mais aucun modèle de rupture primaire n'est proposé en parallèle, ce qui impose le choix d'un diamètre initial, en sortie d'injecteur (en général le diamètre de l'injecteur) ;
- cette approche ne prend pas en compte les phénomènes de collision, de coalescence et d'instabilités liquide/gaz.

Modélisation proposée par Iyer *et al.* [39, 40, 41] Le modèle de transport de l'interface liquide/gaz proposé par Iyer et Abraham [39, 40, 41] se place dans le cadre d'une approche *multi-fluid* du spray. Ici la phase liquide et la phase gaz sont considérées toutes les deux en formulation eulérienne. Deux jeux d'équations de Navier-Stokes sont donc résolus et il existe donc des termes de transferts interfaciaux (masse, quantité de mouvement, énergie) entre les deux phases, par exemple les lois de traînée et d'évaporation. Or, que ce soit pour l'une ou l'autre de ces deux lois, un diamètre D_d calculé à partir de la densité d'interface liquide/gaz $\bar{\Sigma}$ et de la fraction volumique de liquide $\bar{Y}_l$ est nécessaire :

$$D_d = \frac{6\bar{Y}_l}{\bar{\Sigma}} \quad (4.5)$$

Dans le cas d'un écoulement dispersé, les auteurs supposent que la vitesse de l'interface est égale à la vitesse de la phase dispersée. Dans le cas des sprays de liquide, l'interface est donc advectée par

la vitesse du liquide. Une équation de transport pour la densité d'interface est proposée :

$$\frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_{l,i} \bar{\Sigma}}{\partial x_i} = \phi_{vaporisation} + \phi_{breakup} + \phi_{coalescence} \quad (4.6)$$

Le terme source modélisant la vaporisation $\phi_{vaporisation}$ Comme décrit précédemment, les auteurs s'inspirent de lois de comportement habituellement utilisées en formulation lagrangienne. Pour la modélisation de la vaporisation, le terme source correspondant est déterminé à partir de la loi du D^2 :

$$\frac{dD_d^2}{dt} = -K_v \quad (4.7)$$

avec K_v la constante de vaporisation. Elle dépend du taux de vaporisation $\dot{m}$, comme décrit dans le paragraphe 2.2.2. Il vient ainsi directement, en utilisant la relation 4.3 :

$$\phi_{vaporisation} = \dot{\bar{\Sigma}}_{vaporisation} = -K_v \frac{\bar{\Sigma}^3}{36\bar{Y}_l^2} \quad (4.8)$$

avec $\bar{Y}_l$ la fraction volumique de liquide.

Le terme de vaporisation s'obtient donc ici à partir de l'hypothèse de sphéricité des gouttes.

Le terme source modélisant le breakup $\phi_{breakup}$ Pour la modélisation du phénomène de rupture des gouttes, Iyer et Abraham proposent une adaptation du modèle de Reitz [10]. Ce terme source prend alors en compte la croissance de la densité d'interface liquide/gaz due à la rupture observée par le jet liquide et les gouttes qui constituent le spray. La loi d'évolution initiale est la suivante :

$$\frac{dD_d}{dt} = -\frac{D_d - D_{crit}}{\tau_{bu}} \quad (4.9)$$

avec τ_{bu} le temps de rupture de la goutte, temps caractéristique nécessaire pour que le diamètre de la goutte diminue jusqu'à atteindre un état critique stable D_{crit} . En considérant l'expression reliant le diamètre moyen D_d à la densité d'interface liquide/gaz $\bar{\Sigma}$, la loi d'évolution de l'équation 4.9 conduit alors au terme source suivant :

$$\phi_{breakup} = \frac{\bar{\Sigma}}{\tau_{bu}} \left(1 - \frac{\bar{\Sigma}}{\bar{\Sigma}_{crit}} \right) \quad (4.10)$$

avec $\bar{\Sigma}_{crit}$ la densité d'interface liquide/gaz par unité de volume correspondant au diamètre critique D_{crit} .

Le terme source modélisant la coalescence $\phi_{coalescence}$ Afin de modéliser le phénomène de coalescence de gouttes, Iyer et Abraham proposent d'introduire tout d'abord la fréquence de collision f_{coll} , initialement développée par O'Rourke en 1980 [100] et Gidaspow en 1984 [101] :

$$f_{coll} = N_d^2 U_l' \frac{\pi D_d^2}{2} \quad (4.11)$$

avec N_d le nombre de gouttes par unité de volume, D_d le diamètre de ces gouttes et U_l' la vitesse d'agitation inter-gouttes qui peut être considérée comme étant liée à l'énergie cinétique turbulente de

la phase liquide k_l :

$$U'_l = C_{coll} \sqrt{\frac{2k_l}{3}} \quad (4.12)$$

C_{coll} étant une constante de modélisation.

Lorsque l'on considère une collision (au sens général du terme) entre gouttes, plusieurs possibilités sont envisageables. Soit elles se brisent en plusieurs plus petites gouttes, soit elles coalescent. Il est donc possible de définir une efficacité de coalescence η_{coll} , définie à partir d'un nombre de Weber collisionnel We_{coll} ainsi :

$$\eta_{coll} = \min \left[\frac{3.12}{We_{coll}}, 1 \right] \quad (4.13)$$

La valeur "3.12" est proposée par O'Rourke [102] et le nombre de Weber collisionnel est défini à partir de la vitesse d'agitation inter-goutte U'_l :

$$We_{coll} = \frac{\rho_l U_l'^2 D_d}{\sigma_l} \quad (4.14)$$

Ce dernier traduit ainsi la capacité de la goutte à résister à une collision.

En considérant le diamètre de la goutte D_d (relation 4.5) ainsi que le taux de décroissance du nombre de gouttes par unité de volume due à la coalescence :

$$\frac{dN_d}{dt} = -\eta_{coll} f_{coll} \quad (4.15)$$

Les auteurs obtiennent finalement le terme source de destruction $\phi_{coalescence}$, qui peut s'écrire ainsi :

$$\phi_{coalescence} = -\eta_{coll} \bar{\Sigma}^2 \frac{U'_l}{12} \quad (4.16)$$

Bilan sur les modèles d'adaptation des lois d'évolution de gouttes Les deux modèles décrits dans ce paragraphe (Wan et Iyer) sont des exemples d'une extension des approches lagrangiennes. En effet, pour chacun de ces deux modèles, une hypothèse de sphéricité des gouttes est posée : soit directement par le transport d'un diamètre pour Wan, soit à travers les termes de fermeture de l'équation de transport d'une quantité d'interface liquide/gaz pour Iyer. Pour ce dernier, la sphéricité des gouttes est nécessaire lors de la traduction des lois d'évolution du diamètre des gouttes vers des lois d'évolution de la densité d'interface liquide/gaz.

En ce qui concerne la description de l'interface liquide/gaz pour des sprays denses, elle n'est pas abordée dans cette approche bien que les sous-modèles soient utilisés dans la zone dense. Cependant, l'utilisation de tels sous-modèles est déjà une avancée en soit car ils permettent de modéliser l'atomisation tout en palliant les problèmes de dépendance des calculs au maillage utilisé. En effet, les calculs lagrangiens sont sujets à une dépendance forte à la finesse des maillages utilisés. De plus, une approche lagrangienne induit deux types de problèmes :

- la possibilité d'avoir un volume de liquide supérieur au volume de la cellule, en zone proche de l'injecteur là où le maillage est raffiné ;

- lorsqu'un tel raffinement de maillage est utilisé, pour une bonne convergence statistique des méthodes lagrangiennes, il faut en principe augmenter le nombre de particules stochastiques pour garder une bonne convergence statistique et ceci est rarement possible avec les ressources actuelles en terme de puissance de calcul.

Face à ce constat, une approche eulérienne a donc des avantages. Néanmoins, la représentation de la fonction de distribution est peu précise : une seule taille de goutte par maille est calculée. Il serait possible d'améliorer ce point en considérant une fonction de distribution présumée comme le proposent Beck et Watkins [49, 50, 51, 52].

4.1.2.2 Modélisation sans hypothèse de phase dispersée

Ici sont proposées différentes approches de la littérature où une équation de transport de la densité d'interface liquide/gaz est également proposée mais dans un contexte plus général, en essayant d'éviter l'hypothèse de spray constitué de paquets liquides détachés et en s'attachant à une description plausible de la zone dense. Ces travaux sont issus principalement d'une analogie avec le transport d'une surface de flamme, comme décrit au paragraphe 4.1.1.2. L'idée originale vient des travaux de Vallet et Borghi [79, 80].

Modèle de Vallet *et al.* [79, 80] Cette approche est originale par rapport aux autres précédemment citées car elle ne suppose pas la phase liquide comme étant constituée de gouttes sphériques totalement détachées les unes des autres. En fait, l'utilisation même de la quantité de surface à la place du diamètre vient de cette volonté d'obtenir une description plus générale de l'écoulement diphasique. La fermeture proposée pour les différents termes source de l'équation de transport de la densité d'interface liquide/gaz par unité de volume est basée sur une analogie avec l'équation de transport de la densité de surface de flamme et non sur des modèles de transport de gouttes.

Cette étude a été initialement proposée lors de l'étude d'un spray coaxial aéronautique. Une équation de transport pour la densité d'interface liquide/gaz est alors postulée :

$$\frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{u}_i \bar{\Sigma}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\nu_t}{Sc_t} \frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial x_i} \right) + (A + a) \bar{\Sigma} - V_S \bar{\Sigma}^2 \quad (4.17)$$

De par la forme de cette équation, il est possible de distinguer deux phénomènes de production de densité interfaciale :

- l'étirement moyen dû aux grandes échelles de la turbulence A ;
- l'étirement dû aux petites échelles a .

Il existe un troisième terme source qui traite du phénomène de destruction de densité interfaciale par la coalescence, modélisé à l'aide de la vitesse V_S .

L'étirement moyen A est modélisé à l'aide du tenseur de Reynolds. Ce terme permet l'augmentation de la densité d'interface liquide/gaz en présence de fortes contraintes turbulentes et de gradients de vitesse importants :

$$A = \frac{\widetilde{u_i'' u_j''}}{\widetilde{k}} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \quad (4.18)$$

alors que le terme d'étirement a est en fait proportionnel à l'inverse d'un temps caractéristique de turbulence τ_t . En se basant sur des observations antérieures, le régime de rupture par collision doit être considéré comme prépondérant et les auteurs proposent alors un terme de production de densité interfaciale piloté par un temps turbulent mais modélisant les phénomènes de collisions entre paquets liquides :

$$a = a_{coll} = \frac{(L_t \bar{\Sigma})^{2/3}}{(36\pi)^{2/9}} \left(\frac{\rho_l}{\bar{\rho} \tilde{Y}_l} \right)^{4/9} \frac{1}{\tau_t} \quad (4.19)$$

avec L_t l'échelle de longueur caractéristique de la turbulence, ρ_l la densité du liquide, $\bar{\rho}$ la densité moyenne du mélange liquide/gaz et $\tilde{Y}_l$ la fraction massique de liquide. Collisions et coalescences étant des phénomènes liés, on retrouve dans l'expression de la vitesse caractéristique V_S le terme a_{coll} :

$$V_S = \frac{a_{coll} \rho_l D_{crit}}{6 \bar{\rho} \tilde{Y}_l} \quad (4.20)$$

avec D_{crit} un diamètre critique de retour à l'équilibre du modèle en zone diluée, défini ainsi :

$$D_{crit} = \frac{\sigma_l^{3/5} L_t^{2/5} (\bar{\rho} \tilde{Y}_l)^{2/15}}{\tilde{k} \rho_l^{11/15}} \quad (4.21)$$

La forme générale de l'équation de transport de la densité d'interface liquide/gaz ne suppose pas la présence de gouttes. Il faut néanmoins souligner que dans l'estimation de a_{coll} la considération de gouttes reste présente.

Bien qu'il ait été initialement développé pour caractériser les sprays d'un injecteur coaxial, ce modèle peut être étendu à d'autres sprays denses comme ceux obtenus en injection haute pression de type Diesel (et plus récemment en essence). Son domaine de validation impose uniquement des nombres adimensionnels de Reynolds et de Weber importants.

Modèle de Jay *et al.* [103] Ce modèle se base sur les travaux de Vallet précédemment décrits mais utilise une approche plus phénoménologique du problème. Une équation de transport pour la densité d'interface liquide/gaz est donc également utilisée mais les termes source retenus pour caractériser l'évolution de la surface sont choisis comme étant spécifiques au problème étudié par les auteurs à savoir les injecteurs coaxiaux utilisés dans l'aéronautique. Jay introduit alors un terme source modélisant l'effet des instabilités $\phi_{instabilites}$, un autre modélisant la rupture secondaire des gouttes $\phi_{breakup}$ et un dernier pour caractériser l'effet de la vaporisation du carburant $\phi_{vaporisation}$. Il propose une équation de transport de la densité interfaciale ayant la forme suivante :

$$\frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{u}_i \bar{\Sigma}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\nu_t}{Sc_t} \frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial x_i} \right) + \phi_{instabilites} + \phi_{breakup} + \phi_{vaporisation} \quad (4.22)$$

Le terme source modélisant les effets d'instabilités s'appuie sur l'étude d'une couche de cisaillement et s'exprime de la façon suivante :

$$\phi_{instabilites} = b_1 \frac{\rho_g}{\rho_l} \frac{\Delta U}{2 \bar{Y} \ln(\bar{Y}_{crit})} \frac{\partial \bar{Y}}{\partial x_i} \bar{\Sigma} \left(1 - \frac{\bar{\Sigma}^2}{\Sigma_f^2} \right)^{1/2} h \left(1 - \frac{\bar{\Sigma}}{\Sigma_f} \right) \quad (4.23)$$

avec ΔU le différentiel de vitesse à la sortie de la buse entre les phases liquide et gaz, $\bar{Y}_{crit} = 0.01$ la valeur en dessous de laquelle le glissement entre les deux phases peut être considéré comme nul, h la fonction Heavyside et Σ_f la densité interfaciale maximale atteinte sous l'effet d'instabilités. Cette dernière est définie telle que :

$$\frac{1}{\Sigma_f} = \frac{2}{\Sigma_{init}} \exp \left(-B \frac{L_{bu}}{\delta} \frac{1}{J^{1/3}} \right) \quad (4.24)$$

Σ_{init} est la densité interfaciale initiale, proposée par les auteurs comme correspondant au diamètre de l'injecteur, L_{bu} est une longueur caractéristique de rupture telle que $L_{bu} = C_{core} D_{inj} / J^{1/3}$, $J = \rho_g u_g^2 / (\rho_l u_l^2)$ est un rapport de quantité de mouvement entre les deux phases et δ est l'épaisseur de la couche de mélange entre le liquide et le gaz. Les différentes constantes de modélisations sont fixées par les auteurs : $b_1 = 5$, $C_{core} = 10$ et $B = 2.5 \cdot 10^{-3}$.

Sous l'effet des instabilités qui se développent au niveau du jet, la densité interfaciale croît jusqu'à atteindre une valeur critique qui correspond à une sorte de saturation du phénomène. Ce terme est assez proche du terme de production par étirement moyen A défini à l'équation 4.18 du modèle de Vallet *et al.* [79, 80].

Ainsi, le phénomène de rupture primaire par la présence d'instabilités étant modélisé, la seconde phase de l'atomisation peut être caractérisée en adaptant un modèle lagrangien de rupture secondaire. Le modèle *TAB* [76], déjà présenté au paragraphe 2.2.3.2, est choisi ici :

$$\phi_{breakup} = \left(2^{1/3} - 1 \right) \frac{\bar{\Sigma}}{2\tau_{bu}} h(D_d - D_{crit}) \quad (4.25)$$

avec τ_{bu} le temps caractéristique de rupture secondaire des gouttes proposé dans le modèle *TAB* et D_{crit} le diamètre critique défini tel que :

$$D_{crit} = We_{crit}^{3/5} \left(\frac{\sigma_l}{\rho_g} \right)^{3/5} \tilde{\varepsilon}^{-2/5} \quad (4.26)$$

le nombre de Weber critique We_{crit} étant pris égal à 0.3 par la suite.

Hormis la présence de la fonction Heavyside, ce terme est lui aussi assez proche d'un des termes source proposés par Vallet *et al.*, à savoir celui avec un temps de rappel vers un régime critique symbolisé par une densité interfaciale critique (ou un diamètre critique). Pour Vallet, ce terme modélise le double phénomène de collisions/coalescences alors que Jay s'en sert pour caractériser le phénomène de rupture secondaire jusqu'à atteindre une taille de goutte correspondant à un équilibre local.

En ce qui concerne le terme de destruction de densité d'interface liquide/gaz due à la vaporisation, une approche basée sur la loi du " D^2 " est utilisée, de la même façon que l'approche proposée par Iyer *et al.* [39, 40, 41].

De par la présence de certains critères introduits par les auteurs comme l'épaisseur de la couche de mélange entre les deux phases δ , la longueur caractéristique de rupture L_{bu} ou le rapport des quantités de mouvement J , qui sont des critères typiquement utilisés pour des injecteurs coaxiaux, ce modèle est difficilement utilisable pour d'autres types d'injecteurs. En effet, certains de ces critères s'appuient sur des corrélations issues d'études expérimentales d'injecteurs coaxiaux aéronautiques. Néanmoins, c'est le seul modèle qui prend en compte explicitement l'instabilité initiale.

Modèle de Beau *et al.* [84, 85] Plusieurs points sont à retenir des différentes approches précédemment décrites. Tout d'abord, il existe deux méthodes pour la fermeture des différents termes source caractérisant les phénomènes physiques qui agissent sur le jet liquide, soit une adaptation de modèles lagrangiens basés sur un diamètre de goutte soit proposer des fermetures moins spécifiques à un spray liquide dispersé et qui seraient applicables à la zone dense du jet, près de la buse d'injection. Vallet *et al.* [79, 80] vont dans ce sens en proposant par exemple dans l'équation de transport de la densité d'interface liquide/gaz un terme source modélisant les effets de plissement moyen du jet dû aux forts gradients de vitesse rencontrés en sortie d'injecteur. Cependant, adapter des modèles de spray formé de gouttes en zone dispersée est intéressant car cela peut se faire de façon systématique. Ces modèles ainsi obtenus peuvent de plus en inspirer d'autres en zone dense. Dans tous les cas, les modèles de zone dense doivent avoir un comportement qui tend vers celui des modèles de spray de gouttes quand la fraction volumique de liquide diminue.

C'est dans cette optique que se place le modèle de Beau *et al.* [84, 85] en introduisant une équation de transport de la densité d'interface liquide/gaz par unité de volume ayant la forme suivante :

$$\frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{u}_i \bar{\Sigma}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\nu_t}{Sc_t} \frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial x_i} \right) + \phi_{init.} + \phi_{moyen} + \phi_{turb.} + \phi_{coll.} + \phi_{coal.} \quad (4.27)$$

Les auteurs ont choisi comme vitesse d'advection de la densité d'interface liquide/gaz la vitesse moyenne du mélange. Vallet *et al.* ainsi que Jay *et al.* ont également opté pour ce choix. Cela vient du constat suivant : pour le transport de bulles, les auteurs retiennent souvent la vitesse du gaz. Réciproquement, pour le transport de gouttes en phase dispersée d'un jet liquide (Iyer *et al.*, Wan *et al.*), la vitesse du liquide est souvent choisie. S'inscrivant dans une optique de caractérisation d'un jet haute pression de type Diesel où le spray est en partie constitué d'une zone dense près de la buse d'injection (précédée par un écoulement dans l'injecteur où des poches de cavitation peuvent parfois se former) et d'une zone dispersée plus en aval de l'écoulement, le choix d'une vitesse de mélange est un compromis.

Cette équation de transport de la densité interfaciale est basée sur celle proposée par Vallet *et al.* mais certains termes source sont ajoutés et d'autres modifiés.

Les auteurs introduisent tout d'abord un terme source inédit, à savoir un terme de création de densité interfaciale $\phi_{init.}$ proportionnel aux gradients de fraction massique de liquide $\tilde{Y}_l$. En effet, ce terme source agit par exemple au niveau des lèvres de l'injecteur, lorsque le jet sort de la buse. Dans la buse d'injection, dans l'hypothèse d'absence de poches de cavitation, la densité interfaciale liquide/gaz est nulle. Dès que le jet sort de l'injecteur et rentre dans la chambre de combustion, il y a création de densité d'interface. L'expression suivante est proposée :

$$\phi_{init.} = \frac{12\bar{\rho}\mu_t}{\rho_l\rho_g Sc_t L_t} \frac{\partial \tilde{Y}_l}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{Y}_l}{\partial x_i} \quad (4.28)$$

Ce terme d'initialisation propose donc une création d'interface liquide/gaz en zone proche de l'injecteur, en supposant que les premières échelles des structures liquides sont proportionnelles à l'échelle intégrale de turbulence L_t . De par la présence de gradients de fraction massique de liquide plus faibles

en zone dispersée, ce terme devient vite négligeable en comparaison des autres termes source présentés plus bas.

S'inspirant des termes proposés par Vallet *et al.*, les effets d'étirement moyen du jet (dû aux forts gradients de vitesse) ainsi que les effets d'étirement turbulent (dû à la présence de structures turbulentes qui ont tendance à plisser et éplucher le jet) sont modélisés comme suit :

$$\phi_{moyen} = \frac{\widetilde{u_i'' u_j''}}{\widetilde{k}} \frac{\partial \widetilde{u_i}}{\partial x_j} \overline{\Sigma} \quad (4.29)$$

$$\phi_{turb.} = \frac{\overline{\Sigma}}{\tau_t} \quad (4.30)$$

P.-A. Beau s'est aussi intéressé à la modélisation des effets de rupture des gouttes après collision entre elles. Un terme source $\phi_{coll.}$ est donc proposé et s'exprime de la façon suivante :

$$\phi_{coll.} = \frac{\overline{\Sigma}}{\tau_{coll}} \quad (4.31)$$

Comme il est possible de le remarquer, un temps caractéristique de collision τ_{coll} est introduit dans la relation 4.31. Les auteurs se distinguent ici des travaux initialement proposés par Vallet *et al.* [79, 80] et s'inspirent de la définition proposée par Iyer *et al.* [39, 40, 41] à ce sujet, à savoir un temps caractéristique de collision défini à partir d'une longueur caractéristique de collision L_{coll} , d'un différentiel de vitesse de collision ΔV_{coll} et d'une section efficace S_{eff} (pour une meilleure représentation de ces différentes grandeurs, se référer à la figure 4.2). Le temps caractéristique de collision s'exprime donc ainsi :

$$\tau_{coll} = \frac{L_{coll}^3}{S_{eff} \Delta V_{coll}} \quad (4.32)$$

Cette formulation vient d'une adaptation des modèles lagrangiens et prend en compte une notion de probabilité de collision en fonction du diamètre des gouttes considérées. En effet, en introduisant une section efficace, ce modèle traduit le fait que des gouttes plus petites ont une probabilité de collision plus faible.

La longueur caractéristique de collision est définie comme étant la distance moyenne entre les gouttes et fait donc, par définition, intervenir le nombre de gouttes par unité de volume N_d , comme suit :

$$L_{coll} = N_d^{-1/3} \quad (4.33)$$

En considérant les gouttes comme sphériques, il est possible de définir le nombre de gouttes par unité de volume N_d comme étant fonction de la densité moyenne d'interface liquide/gaz et de la fraction massique moyenne de liquide :

$$N_d = \frac{\rho_l^2 \overline{\Sigma}^3}{36\pi \bar{\rho}^2 \widetilde{Y}_l^2} \quad (4.34)$$

La surface efficace de collision S_{eff} peut quant à elle être approchée par :

$$S_{eff} = \frac{8\pi \bar{\rho}^2 \widetilde{Y}_l^2}{\rho_l^2 \overline{\Sigma}^2} \quad (4.35)$$

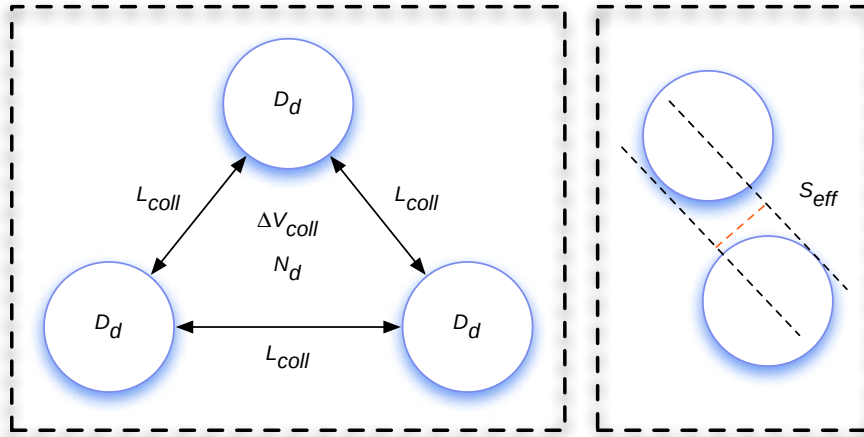


FIG. 4.2 – Schéma de principe d'une collision entre gouttes

Un dernier point où les auteurs se distinguent des travaux de Vallet *et al.*, c'est sur le choix du différentiel de vitesse de collision ΔV_{coll} . Vallet *et al.* ont choisi d'utiliser les fluctuations de vitesse à l'échelle inter-gouttes en suivant l'hypothèse de Kolmogorov pour déterminer sa valeur en fonction de l'énergie cinétique totale et de la dissipation totale. Iyer *et al.* ont retenu une autre expression, directement reliée à l'énergie cinétique turbulente de la phase liquide. Cependant, dans un modèle de mélange, il n'est pas directement possible d'avoir accès à cette grandeur. L'utilisation de l'énergie cinétique turbulente du mélange liquide/gaz est alors proposée par Beau *et al.*, en considérant qu'en zone dense, là où les collisions sont très fréquentes, la fraction massique de liquide est importante et donc l'énergie cinétique turbulente du mélange est relativement proche de celle de la phase liquide.

$$\Delta V_{coll} \propto \sqrt{\tilde{k}} \quad (4.36)$$

Toujours selon les auteurs, le choix d'exprimer le différentiel de vitesse de collision en fonction de l'énergie cinétique turbulente moyenne du mélange plutôt qu'en fonction de son taux de dissipation (cf approche de Vallet *et al.*) est aussi motivé par le fait que l'énergie cinétique turbulente est mieux modélisée que son taux de dissipation. Une estimation un peu plus robuste est ainsi espérée en utilisant cette approche.

En ce qui concerne le terme puits $\phi_{coal.}$ modélisant les effets de coalescence des gouttes, Beau *et al.* proposent un terme de retour à un régime critique de coalescence, symbolisé par une densité d'interface liquide/gaz critique Σ_{crit} :

$$\phi_{coal.} = -\frac{\bar{\Sigma}^2}{\tau_{coll}\Sigma_{crit}} \quad (4.37)$$

avec :

$$\Sigma_{crit} = \frac{6\bar{\rho}\tilde{Y}_l}{\rho_l D_{crit}} \quad (4.38)$$

Deux possibilités ont été envisagées par les auteurs pour définir le diamètre de régime critique de coalescence D_{crit} . La première est inspirée de l'approche de Vallet *et al.* [79, 80]. Ces derniers

posent l'hypothèse qu'en présence d'un milieu en turbulence entretenue contenant une quantité fixe de liquide, le diamètre des gouttes tend vers un diamètre critique. Il correspond au diamètre obtenu après une collision binaire, une des gouttes se divisant en deux gouttes de taille identique en ayant une conversion intégrale de l'énergie cinétique de la goutte mère en énergie surfacique. Selon Beau *et al.*, cette hypothèse peut s'avérer limitante car illustrant un cas idéal. Pour cette raison, ces auteurs proposent de considérer un processus plus complexe où la répartition de l'énergie cinétique et de l'énergie surfacique se fait suivant un nombre de Weber collisionnel évalué expérimentalement. Le raisonnement est le suivant : soient $N_{initial}$, $KE_{initial}$ et $SE_{initial}$ respectivement le nombre de gouttes par unité de volume, l'énergie cinétique et l'énergie surfacique avant collision. Soient N_{final} , KE_{final} et SE_{final} les équivalents après collision. Le diamètre d'équilibre peut alors s'obtenir en écrivant la relation de conservation de l'énergie lors d'une collision entre gouttes :

$$N_{initial}KE_{initial} + N_{initial}SE_{initial} = N_{final}KE_{final} + N_{final}SE_{final} \quad (4.39)$$

En considérant un diamètre avant collision $D_{initial}$ et un diamètre après collision D_{final} , il vient :

$$N_{initial} \left(\rho_l \frac{\pi}{6} \Delta V_{initial}^2 D_{initial}^3 + \pi \sigma_l D_{initial}^2 \right) = N_{final} \left(\rho_l \frac{\pi}{6} \Delta V_{final}^2 D_{final}^3 + \pi \sigma_l D_{final}^2 \right) \quad (4.40)$$

Lors d'une collision entre gouttes, la masse de liquide se conserve, ce qui permet d'obtenir l'expression suivante pour le diamètre après collision :

$$D_{final} = D_{initial} \frac{1 + We_{final}/6}{1 + We_{initial}/6} \quad (4.41)$$

Le diamètre de régime critique de coalescence D_{crit} est atteint lorsque le processus de rupture par collisions s'arrête, *i.e.* lorsque le nombre de Weber collisionnel final est égal au nombre de Weber critique :

$$D_{crit} = D_{32} \frac{1 + We_{crit}/6}{1 + We_{coll.}/6} \quad (4.42)$$

Le nombre de Weber critique utilisé ici est fixé à $We_{crit} = 15$ en se basant sur les travaux de Qian *et al.* [104].

Beau *et al.* [84, 85] proposent donc une équation de transport de la densité d'interface liquide/gaz moyenne par unité de volume, s'inspirant des travaux de Vallet *et al.* [79, 80] pour la prise en compte des effets de turbulence et d'étirement moyen, et des travaux de Iyer *et al.* [39, 40, 41] pour la caractérisation des effets de collision sur la taille des gouttes formées en zone diluée du jet. A cela, est ajouté un terme d'initialisation de la densité d'interface liquide/gaz proportionnel aux gradients de fraction massique de liquide. La caractérisation du régime critique de collision/coalescence est obtenue en introduisant un nombre de Weber expérimental.

Des améliorations sont cependant encore possibles. En effet, la modélisation proposée par Beau *et al.* ne concerne que des sprays Diesel "à froid" ; c'est-à-dire que les effets de vaporisation sur la taille des paquets liquides formés par le jet ne sont pas pris en compte. De plus, le régime de rupture secondaire des gouttes, provoqué par le différentiel de vitesse entre les phases liquide et gaz n'est pas considéré. C'est sur cette base de travail que s'inscrit l'étude présentée ici.

4.2 Proposition d'une équation de transport de la densité d'interface liquide/gaz

Comme il a déjà été présenté au paragraphe précédent, deux approches sont possibles pour proposer des termes source modélisant différents phénomènes physiques que rencontrent un jet liquide haute pression de type Diesel dans une chambre de combustion : soit une adaptation de modèles lagrangiens imposant donc une phase liquide dispersée et des gouttes sphériques, soit une approche plus globale où l'on essaie de s'affranchir de la notion de goutte. La deuxième solution semble être la plus prometteuse mais peut s'avérer difficile à appréhender lorsqu'il s'agit de modéliser des phénomènes qui n'apparaissent uniquement qu'en zone diluée du jet. En effet, dans de telles situations, l'utilisation du diamètre comme longueur caractéristique est appropriée.

4.2.1 Lien entre les parties dense et diluée d'un spray

Il a donc été décidé d'introduire une fonction indicatrice qui permet de pondérer l'effet des différents termes source de l'équation de transport de la densité d'interface liquide/gaz moyenne par unité de volume $\bar{\Sigma}$. Cette fonction Ψ renvoie la valeur 1 lorsque la fraction volumique de liquide ϕ_l est supérieure à une valeur ϕ_{dense} et renvoie une valeur 0 lorsque ϕ_l est inférieure à une valeur $\phi_{diluée}$. L'exemple le plus simple d'une telle fonction est présenté en figure 4.3. Ici, une régression linéaire entre les points $(\phi_{dense}, 1)$ et $(\phi_{diluée}, 0)$ a été choisie.

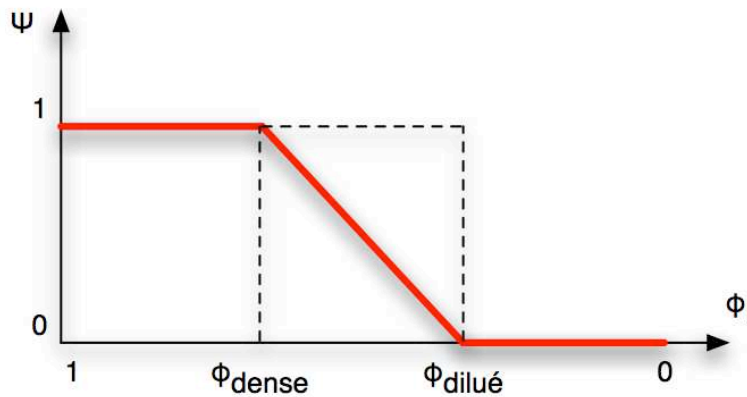


FIG. 4.3 – Fonction indicatrice Ψ pondérant l'effet des différents termes source en fonction de la zone du spray considéré

Une fonction plus élaborée, comme par exemple la fonction *erreur* (*erf*), pourrait être utilisée mais n'ayant pas d'éléments pour justifier ce choix, une fonction linéaire paraît appropriée, au moins dans un premier temps.

ϕ_{dense} et $\phi_{diluée}$ peuvent être assimilés à des paramètres numériques du modèle *ELSA*. $\phi_{diluée} = 0.1$ correspond à une valeur de fraction volumique de liquide de 10%, valeur communément admise pour considérer un spray comme dilué. $\phi_{dense} = 0.5$ montre la frontière qui sépare les inclusions de liquide

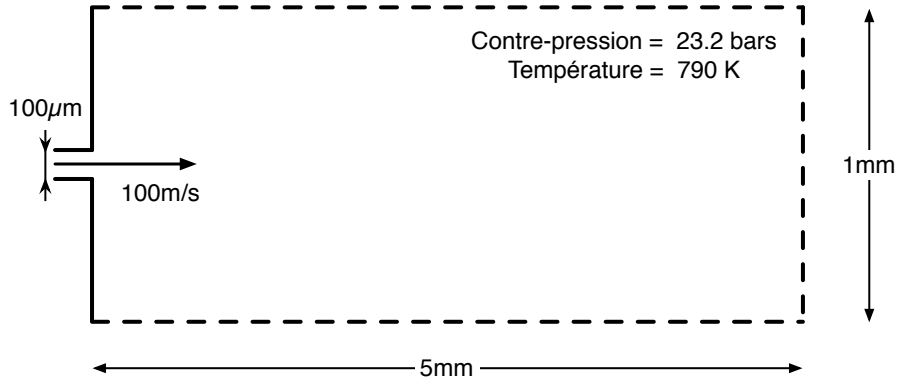


FIG. 4.4 – Configuration choisie pour la mise en évidence des différents termes source de l'équation de transport de la densité d'interface liquide/gaz proposée pour cette étude

dans du gaz des inclusions de gaz (bulles) dans du liquide.

Les différents champs de valeurs présentés dans cette section 4.2 et présentés en figures 4.6, 4.7, 4.8, 4.9 et 4.11 correspondent à un cas de calcul similaire à celui présenté à la section 6.1 mais avec une température des gaz dans la chambre de combustion de l'ordre de $790K$, afin de mettre en évidence les effets de vaporisation du carburant en environnement chaud. La figure 4.4 résume l'ensemble des conditions de calcul.

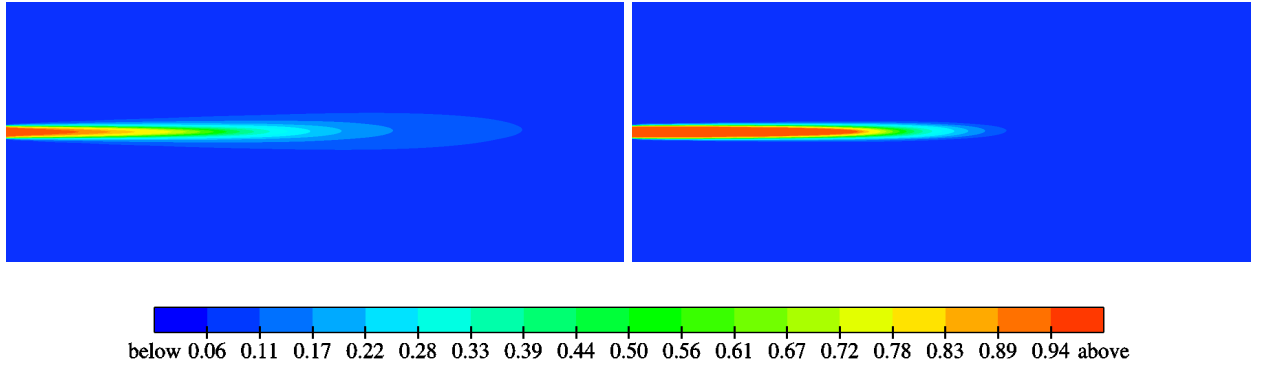


FIG. 4.5 – Exemple d'un champ de valeurs de fraction volumique de liquide à gauche et d'un champ de valeurs de la fonction indicatrice Ψ à droite

La figure 4.5 présente un champ de fraction volumique de liquide et la fonction indicatrice Ψ correspondante dans la configuration présentée en figure 4.4.

L'équation de transport pour la densité d'interface liquide/gaz par unité de masse $\tilde{\Omega}$ est inspirée de celle proposée par Beau *et al.* [84, 85], en y incorporant un terme source $\phi_{vapo.}$ qui prend en compte les effets de vaporisation et un terme source ϕ_{2ndBU} caractérisant le phénomène de rupture secondaire.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{\Omega}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\tilde{\rho} u_j \tilde{\Omega} \right) = & - \frac{\partial \tilde{\rho} u_j'' \omega''}{\partial x_j} \\ & + \Psi (\phi_{init.} + \phi_{turb.}) + (1 - \Psi) (\phi_{coll./coal.} + \phi_{2ndBU}) + \phi_{vapo.} \end{aligned} \quad (4.43)$$

Il est alors possible de déterminer un diamètre moyen, à l'aide de la densité du liquide ρ_l et de la fraction massique de liquide $\tilde{Y}_l$:

$$D_{32} = \frac{6\tilde{Y}_l}{\rho_l \tilde{\Omega}} \quad (4.44)$$

Il s'agit maintenant de détailler les différents termes présents dans l'équation 4.43 car ce sont eux qui déterminent la topologie du spray en terme de taille des gouttes liquides issues de l'atomisation du jet.

4.2.2 Modélisation en zone dense du spray

Initialisation de la densité d'interface liquide/gaz Le terme source d'initialisation de la densité d'interface liquide/gaz par unité de masse $\phi_{init.}$ est directement repris de l'étude proposée par Beau *et al.* [84, 85].

$$\phi_{init.} = \frac{12\bar{\rho}\mu_t}{\rho_l\rho_g Sc_t L_t} \frac{\partial \tilde{Y}_l}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{Y}_l}{\partial x_i} \quad (4.45)$$

Comme le préconise ces mêmes auteurs, ce terme d'initialisation propose donc une création d'interface liquide/gaz en zone proche de l'injecteur, en supposant que les premières échelles des structures liquides soient proportionnelles à l'échelle intégrale de turbulence L_t . Il permet ainsi de fixer les conditions limites de l'équation 4.43. La figure 4.6 illustre le fait que ce terme d'initialisation ne joue un rôle qu'en zone proche de la buse d'injection.

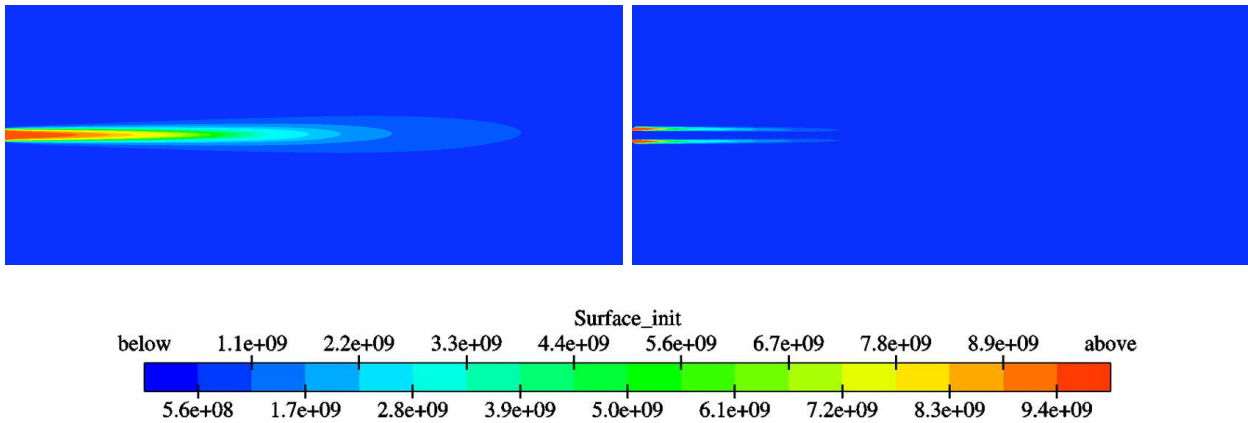


FIG. 4.6 – Champ de valeurs de fraction volumique de liquide ϕ_l à gauche avec une échelle de couleurs identique à celle présentée en figure 4.5 - champ de valeurs pour le terme source $\Psi\phi_{init.}$ par unité de volume à droite

Impact de la turbulence sur la densité d'interface liquide/gaz Il s'agit ici d'appréhender les effets de la turbulence sur l'évolution de la taille des paquets liquides issues de l'atomisation du jet. Ce terme source agissant en zone dense, près du nez de l'injecteur, il est très difficile d'y accéder optiquement. Des comparaisons expérimentales ne sont donc pas possibles à l'heure actuelle. Un terme

source reflétant les effets de plissement moyen du jet en présence de forts gradients de vitesse et/ou les effets d'étirement dû aux structures turbulentes environnant le jet est proposé :

$$\phi_{turb.} = \frac{\bar{\rho}\tilde{\Omega}}{\tau_t} \left(1 - \frac{\tilde{\Omega}}{\tilde{\Omega}_{crit,1}} \right) \quad (4.46)$$

Ce terme source est en fait un regroupement des deux termes initialement utilisés par Beau *et al.* [84, 85] et décrits aux équations 4.29 et 4.30. Il a été choisi ici de les rassembler en un seul sous cette forme, pour mettre en évidence la dualité entre les phénomènes de création et de destruction de densité d'interface liquide/gaz en zone dense, dans un environnement fortement turbulent. En effet, le carburant injecté à haute vitesse développe sa propre turbulence, dont l'intensité est bien supérieure à celle initialement présente dans la chambre de combustion. Les phénomènes physiques rencontrés près de la buse d'injection sont donc relativement difficiles à appréhender. Pour éviter d'introduire une notion de diamètre, il est possible de définir un nombre de Weber "turbulent" comme le rapport entre l'énergie cinétique turbulente et l'énergie de surface :

$$We_{turb.} = \frac{\bar{\rho}k\tilde{Y}_l}{\sigma_l\tilde{\Sigma}} = \frac{\tilde{k}\tilde{Y}_l}{\sigma_l\tilde{\Omega}} \quad (4.47)$$

Il permet ainsi d'établir un régime d'équilibre $\tilde{\Omega}_{crit,1}$ entre la création et la destruction d'interface liquide/gaz provoquées par la turbulence présente dans cette zone de l'écoulement. En considérant l'équilibre entre l'énergie cinétique turbulente et l'énergie de surface, ce nombre de Weber critique peut être fixé à 1, ce qui permet d'obtenir :

$$\tilde{\Omega}_{crit,1} = \frac{\tilde{k}\tilde{Y}_l}{\sigma_l} \quad (4.48)$$

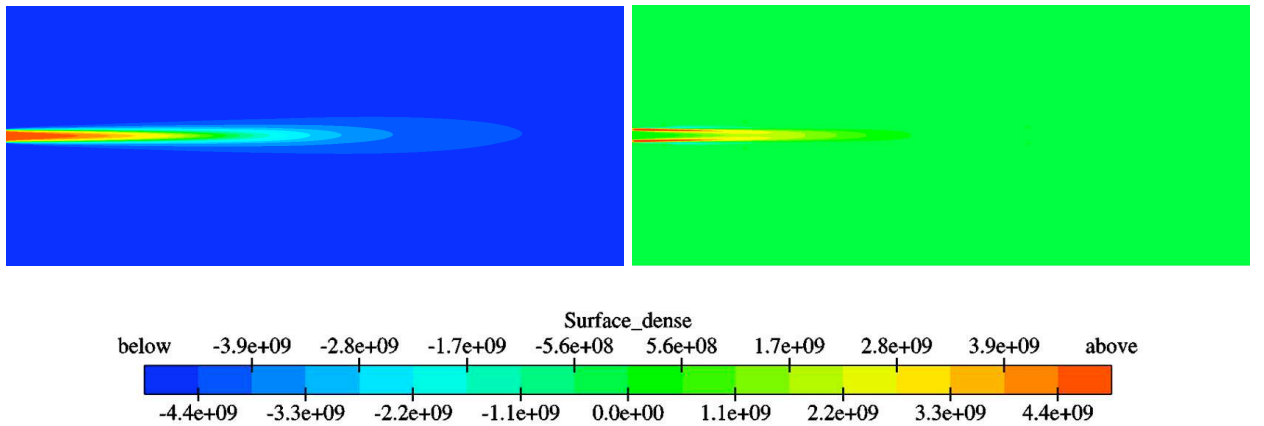


FIG. 4.7 – Champ de valeurs de fraction volumique de liquide ϕ_l à gauche avec une échelle de couleurs identique à celle présentée en figure 4.5 - champ de valeurs pour le terme source $\Psi\phi_{turb.}$ par unité de volume à droite

Le champ de valeurs du terme source $\phi_{turb.}$ présenté en figure 4.7 indique que ce terme agit principalement dans les zones de fort cisaillement entre les phases liquide et gaz, où l'énergie cinétique

turbulente $\tilde{k}$ y est importante. *A contrario*, ce terme source est faible en zone très dense, dans le cœur du jet liquide où la présence de gaz est très peu probable.

4.2.3 Modélisation en zone diluée du spray

Prise en compte des effets de collisions et de coalescences Beau [84, 85] s'est particulièrement intéressé durant sa thèse à la modélisation des phénomènes de collisions et de coalescences et à leur intégration dans l'équation de transport de la densité moyenne d'interface liquide/gaz par unité de masse $\tilde{\Omega}$.

Les travaux de Beau sont repris dans cette étude et le terme source $\phi_{coll./coal.}$ est défini ainsi :

$$\phi_{coll./coal.} = \frac{\bar{\rho}\tilde{\Omega}}{\tau_{coll}} \left(1 - \frac{\tilde{\Omega}}{\tilde{\Omega}_{crit,2}} \right) \quad (4.49)$$

Cette écriture est en fait une synthèse des termes $\phi_{coll.}$ et $\phi_{coal.}$ respectivement définis aux équations 4.31 et 4.37. La définition du temps caractéristique de collision τ_{coll} est disponible via la relation 4.32. De façon similaire au terme caractérisant les effets de turbulence en zone dense du jet, ce terme source met en évidence cette dualité entre les phénomènes de collision et de coalescence, en introduisant un régime d'équilibre $\tilde{\Omega}_{crit,2}$ entre les deux. Comme le préconise Beau, ce régime d'équilibre est défini à partir d'un diamètre d'équilibre $D_{crit,2}$:

$$D_{crit,2} = D_{32} \frac{1 + \frac{We_{crit,2}}{6}}{1 + \frac{We_{coll}}{6}} \quad (4.50)$$

Le nombre adimensionnel de Weber collisionnel est défini de la façon suivante, à partir d'une vitesse caractéristique basée sur l'énergie cinétique turbulente :

$$We_{coll} = \frac{\rho_l \tilde{k} D_{32}}{\sigma_l} \quad (4.51)$$

En ce qui concerne le nombre de Weber critique $We_{crit,2}$, en s'inspirant des travaux de Qian *et al.* [104], Beau propose $We_{crit,2} = 15$. Une autre approche consistant à considérer un équilibre entre les forces de tension de surface et les forces d'énergie cinétique permet d'obtenir une autre valeur pour $We_{crit,2}$:

$$\frac{1}{2} m_l u_l^2 = \sigma_l S_l \quad \text{donc :} \quad We_{crit,2} = \frac{\rho_l u_l^2 D_{32}}{\sigma_l} = 12 \quad (4.52)$$

Cette démarche est retenue pour la suite de l'étude et fixe ainsi une valeur pour $We_{crit,2}$ similaire à celle choisie pour $We_{crit,1}$.

La figure 4.8 présente à droite un champ de valeurs du terme source $\phi_{coll./coal.}$: il existe peu de zones où la coalescence prend le pas sur le phénomène de collision, la principale se situant en périphérie du cœur liquide, près de la buse d'injection. En dehors de cette région du jet liquide, ce sont les phénomènes de collision qui prédominent, principalement là où l'agitation turbulente est importante. C'est une réponse attendue du modèle car le nombre de Weber collisionnel est défini à partir d'une vitesse caractéristique $\sqrt{\tilde{k}}$.

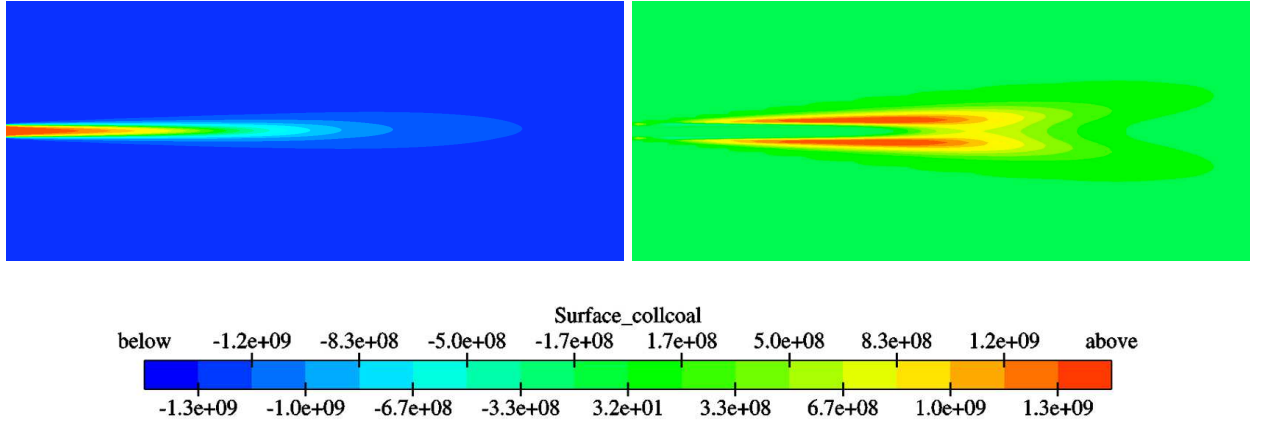


FIG. 4.8 – Champ de valeurs de fraction volumique de liquide ϕ_l à gauche avec une échelle de couleurs identique à celle présentée en figure 4.5 - champ de valeurs pour le terme source $(1 - \Psi)\phi_{coll./coal.}$ par unité de volume à droite

Effets de rupture secondaire ou “secondary breakup” La prise en compte du phénomène physique de rupture secondaire dans l'équation de transport de la densité d'interface liquide/gaz est basée sur une adaptation d'un des modèles lagrangiens déjà disponibles dans la littérature. En effet, en se basant sur la relation 4.44 qui relie le diamètre moyen de Sauter D_{32} à la densité d'interface $\tilde{\Omega}$ et sur la relation 4.9 qui est la base du modèle d'atomisation secondaire proposé par Reitz [10], il est possible d'écrire :

$$\phi_{2ndBU} = \frac{\bar{\rho}\tilde{\Omega}}{\tau_{2ndBU}} \left(1 - \frac{\tilde{\Omega}}{\tilde{\Omega}_{crit,3}} \right) \quad (4.53)$$

Or le phénomène d'atomisation secondaire agit comme son nom l'indique sur la taille des gouttes en la diminuant. Ce qui revient, à masse liquide égale, à considérer une densité d'interface liquide/gaz qui croît. Il est donc choisi ici de ne s'intéresser qu'aux valeurs positives renvoyées par ce terme source ϕ_{2ndBU} :

$$\phi_{2ndBU} = \text{Max} \left[\frac{\bar{\rho}\tilde{\Omega}}{\tau_{2ndBU}} \left(1 - \frac{\tilde{\Omega}}{\tilde{\Omega}_{crit,3}} \right); 0 \right] \quad (4.54)$$

Il reste à déterminer le temps caractéristique de rupture secondaire τ_{2ndBU} ainsi que le régime critique d'atomisation piloté par $\tilde{\Omega}_{crit,3}$. Pour ce faire, il a été choisi de s'inspirer de l'approche de Pilch et Erdman [77] qui proposent de déterminer le temps caractéristique de rupture τ_{2ndBU} en fonction du nombre de Weber gazeux local We_g . Ainsi ces auteurs distinguent six régimes de rupture secondaire différents et introduisent un paramètre T :

$$T = \begin{cases} 6 (We_g - 12)^{-0.25} & \text{pour } We_{crit,3} \leq We_g < 18 \\ 2.45 (We_g - 12)^{0.25} & \text{pour } 18 \leq We_g < 45 \\ 14.1 (We_g - 12)^{-0.25} & \text{pour } 45 \leq We_g < 351 \\ 0.766 (We_g - 12)^{0.25} & \text{pour } 351 \leq We_g < 2670 \\ 5 & \text{pour } We_g \geq 2670 \end{cases} \quad (4.55)$$

Grâce à cela, il est alors possible d'estimer le temps caractéristique τ_{2ndBU} en fonction de ces différents régimes de rupture secondaire :

$$\tau_{2ndBU} = T \frac{D_{32}}{u_{rel}} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \quad (4.56)$$

En ce qui concerne la définition du régime critique d'atomisation secondaire, elle est basée entre autres sur un nombre de Weber critique $We_{crit,3}$, la tension de surface σ_l et la vitesse relative liquide/gaz u_{rel} :

$$\tilde{\Omega}_{crit,3} = \frac{6\rho_g u_{rel}^2 \tilde{Y}_l}{\rho_l \sigma_l We_{crit,3}} \quad (4.57)$$

Pilch et Erdman proposent un nombre de Weber critique fonction de la viscosité du liquide, par l'intermédiaire du nombre adimensionnel d'Ohnesorge Oh :

$$We_{crit,3} = 12 (1 + 1.077 Oh^{1.6}) \quad (4.58)$$

En pratique, dans des applications de type injection haute pression Diesel ou essence, la viscosité du liquide renvoie des valeurs de nombre d'Ohnesorge relativement faibles et donc des nombres de Weber critiques toujours aux alentours de 12.

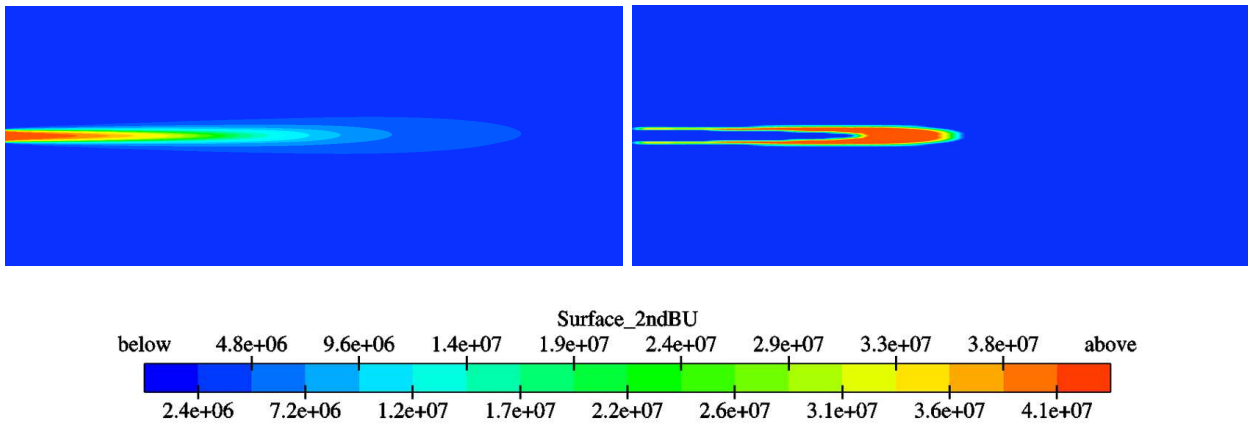


FIG. 4.9 – Champ de valeurs de fraction volumique de liquide ϕ_l à gauche avec une échelle de couleurs identique à celle présentée en figure 4.5 - champ de valeurs pour le terme source $(1 - \Psi)\phi_{2ndBU}$ par unité de volume à droite

La figure 4.9 présente à droite un champ de valeurs du terme source ϕ_{2ndBU} où les valeurs maximales se retrouvent en périphérie du cœur liquide, là où encore certaines gouttes vont subir des forces aérodynamiques importantes, dues principalement à un différentiel de vitesse liquide/gaz conséquent. Par contre, en se référant aux échelles de couleurs, il est remarquable que le terme source ϕ_{2ndBU} atteint des maxima aux alentours de $5 \cdot 10^7 m^{-4} \cdot s^{-1}$ qui, comparés à ceux de $\phi_{coll./coal.}$, sont dix à cent fois plus faibles. Cette constatation est conforme à la théorie de l'atomisation d'un jet qui décrit le régime dit d' "atomisation" comme étant le régime qui produit le plus de toutes petites gouttes

en se détachant du cœur liquide. En effet, des valeurs de ϕ_{2ndBU} faibles indiquent que le régime de rupture secondaire n'est pas prépondérant dans la cascade des phénomènes physiques que subit un jet liquide lorsqu'il s'atomise. Par conséquent, ce modèle d'atomisation basé sur cette équation de densité d'interface prédit des tailles de gouttes détachées du cœur liquide déjà très faibles comparées aux diamètres critiques de rupture secondaire.

Influence de la vaporisation sur la taille des gouttes formées Un calcul intermédiaire passant par la loi du “ D^2 ” est nécessaire pour déterminer le terme source lié à la vaporisation. Considérons un volume de calcul contenant n_d gouttes. La quantité de surface contenue dans ce volume est donc : $n_d \pi D_d^2$. En négligeant la variation du nombre de gouttes n_d au cours du temps (les phénomènes de collision, de coalescence et de break-up secondaire sont modélisés par d'autres termes de l'équation de transport de la quantité de surface $\tilde{\Omega}$), le terme source modélisant la vaporisation peut être calculé de la façon suivante :

$$\phi_{vapo.} = \tilde{\rho} \tilde{\Omega}_{vap} = \frac{dn_d S_d}{dt} = \pi n_d \frac{dD_d^2}{dt} \quad (4.59)$$

Or, en se référant à la relation 2.16, il est possible de réécrire la loi d'évolution temporelle du diamètre des gouttes sous l'effet de la vaporisation ainsi :

$$\frac{dD_d^2}{dt} = -\frac{4\dot{m}_{vap}}{\pi \rho_l D_d} \quad (4.60)$$

En introduisant le nombre de gouttes par unité de volume n_d :

$$n_d = \frac{1}{36\pi} \frac{\rho_l^2 \tilde{\rho} \tilde{\Omega}^3}{\tilde{Y}_l^2} \quad (4.61)$$

ainsi le que le diamètre moyen eulérien :

$$D_{32} = \frac{6\tilde{Y}_l}{\rho_l \tilde{\Omega}} \quad (4.62)$$

la relation 4.59 peut être réécrite de la façon suivante :

$$\phi_{vapo.} = -\frac{2}{3} \frac{\tilde{\rho} \tilde{\Omega}^2}{\tilde{Y}_l} \dot{m}_{v,ELSA} \quad (4.63)$$

Le terme source $\phi_{vapo.}$ caractérisant les effets de vaporisation sur la densité d'interface liquide/gaz fait intervenir dans son expression le taux de vaporisation par unité de surface $\dot{m}_{v,ELSA}$. Ce dernier est obtenu à partir de l'approche d'Abramzon et Sirignano [61, 62] présentée à la section 2.2.2 et par la suite adapté à l'aide de la relation 3.22 présentée à la section 3.3.1.

Le terme de vaporisation s'obtient donc ici à partir de l'hypothèse de sphéricité des gouttes. Il serait plus intéressant de prendre en compte l'évaporation en zone dense à travers l'expression d'un terme source faisant intervenir un taux de vaporisation par unité de surface. Les travaux de Burluka [105] vont dans ce sens, en considérant un film liquide plan vaporisant.

Cependant, le choix de considérer les gouttes comme sphériques et donc de proposer une modélisation de la vaporisation pour la zone diluée de l'écoulement est compréhensible. En effet, dans la

zone près du nez de l'injecteur, l'existence du cœur liquide freine probablement le phénomène de vaporisation, en l'absence de gaz environnant. De plus, les fortes vitesses observées dans cette zone doivent advecter très rapidement en dehors de la zone dense la faible quantité de carburant vaporisé. Enfin, la phase liquide possède une certaine inertie thermique et il est fort peu probable que le liquide ait le temps de se réchauffer suffisamment pour vaporiser, en considérant la vitesse de la phase liquide et la longueur du dard liquide (de l'ordre d'une ou deux dizaines de diamètres).

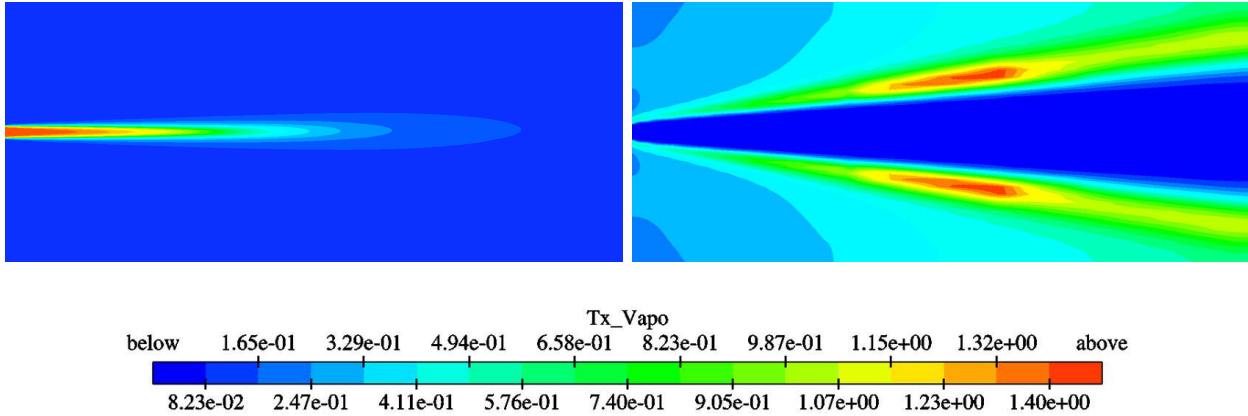


FIG. 4.10 – Champ de valeurs de fraction volumique de liquide ϕ_l à gauche avec une échelle de couleurs identique à celle présentée en figure 4.5 - champ de valeurs pour le taux de vaporisation par unité de surface $\dot{m}_{v,ELSA}$ à droite

La figure 4.10 présente à droite un exemple de champ de valeurs du taux de vaporisation par unité de surface $\dot{m}_{v,ELSA}$. Ce champ de valeurs permet d'illustrer le fait que le régime de vaporisation est principalement piloté par le différentiel de vitesse liquide/gaz. En effet, que ce soit la figure 4.10 ou la figure 4.11 qui elle, présente un champ de valeurs du terme source $\phi_{vapo.}$, les valeurs maximales sont obtenues dans des zones où la vitesse relative u_{rel} est importante.

4.2.4 Bilan sur la modélisation proposée dans cette étude

Une fermeture phénoménologique de l'équation de transport de la densité moyenne d'interface liquide/gaz par unité de masse est proposée dans cette étude. Elle représente en fait une synthèse des travaux de Vallet *et al.* [79, 80], Iyer *et al.* [39, 40, 41] et Beau *et al.* [84, 85].

Une distinction entre des fermetures avec et sans hypothèse de phase dispersée est introduite, pour ainsi tirer au mieux parti de chacune des approches disponibles dans la littérature. Pour ce faire, la fonction Ψ est définie. Elle permet de contre-balancer les effets des différents termes source en fonction de la région du spray considérée.

L'équation de transport présentée dans son ensemble ici prend en compte la majorité des phénomènes physiques que subit un jet liquide lorsqu'il s'atomise : étirement et plissement turbulent, collisions et coalescences, rupture secondaire sous l'effet du différentiel de vitesse liquide/gaz et enfin vaporisation du liquide.

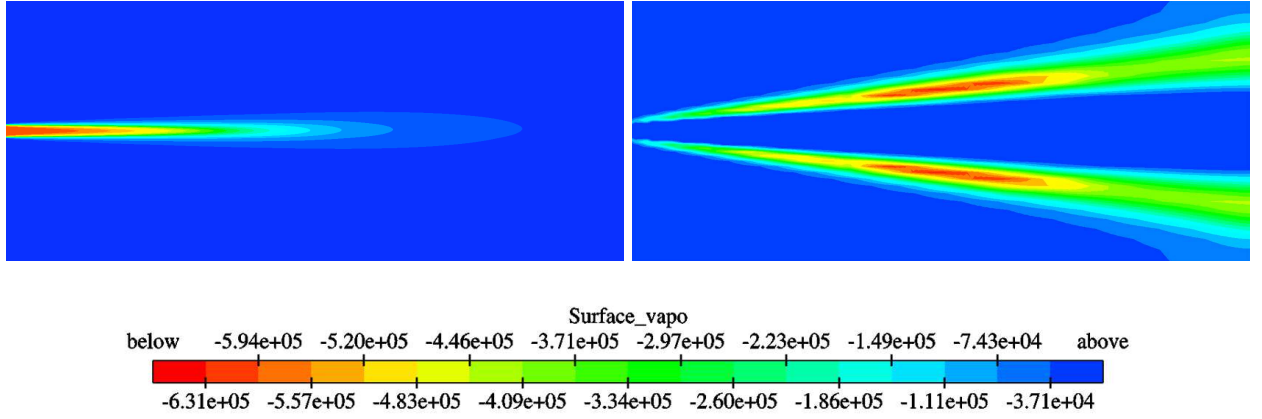


FIG. 4.11 – Champ de valeurs de fraction volumique de liquide ϕ_l à gauche avec une échelle de couleurs identique à celle présentée en figure 4.5 - champ de valeurs pour le terme source $(1 - \Psi)\phi_{vapo}$. par unité de volume à droite

Cette équation sera testée par la suite, au chapitre 6 : d'abord en comparant les résultats obtenus avec le modèle *ELSA* avec ceux issus d'un calcul de type DNS proposé par Ménard *et al.* [21], ensuite avec des conditions d'utilisation Diesel contemporaines. Il s'agit donc ici de tester le modèle *a priori*, sans introduire de constantes de modélisation devant chacun des termes source. Une telle démarche permet donc d'utiliser le modèle dans son écriture la plus simple, sans dénaturer la répartition des rôles de chacun des termes source et donc des phénomènes physiques représentés.

Chapitre 5

Fermeture des termes de flux turbulents

Au chapitre 3, le modèle *ELSA* a été présenté dans son ensemble. Il en résulte que ce modèle est bâti autour de deux principales équations : une modélisant tous les phénomènes physiques agissant sur la taille des gouttes liquides issues de l’atomisation du jet (l’équation de transport de la densité d’interface liquide/gaz) et une autre modélisant la dispersion du liquide dans la chambre de combustion (l’équation de transport de la fraction massique de liquide). Comme il a déjà été expliqué aux paragraphes 3.1.3 et 3.4, cette équation de transport de la fraction massique de liquide fait intervenir un terme de flux turbulent $\widetilde{\rho u_i'' y_l''}$. Ce terme de flux turbulent peut être vu comme étant la corrélation des fluctuations de vitesse u_i'' avec les fluctuations de fraction massique y_l'' . Il peut aussi être considéré comme étant un terme de transport de la fraction massique de liquide par la vitesse fluctuante, *i.e.* un terme de transport turbulent ou de flux turbulent.

Ce chapitre présente les différentes approches possibles et déjà envisagées par le passé pour la fermeture de ce terme de transport turbulent. Ensuite, une méthode de couplage originale développée à l’occasion de cette étude entre les formalismes eulérien et lagrangien sera présentée en vue de son utilisation pour la fermeture de ce type de termes.

5.1 Fermeture au premier ordre

Ce terme de flux turbulent apparaît lors de la prise de moyenne de Reynolds et du choix de la vitesse de mélange $\widetilde{u}_i$ comme vitesse de transport pour la fraction massique de liquide (*cf* équation 3.7). Lors de l’utilisation d’un modèle de mélange comme l’est le modèle *ELSA*, l’approche standard consiste à fermer ce flux par une loi de diffusion de type “loi gradient” ou “loi de Fick”. Derrière cette fermeture, le flux $\widetilde{\rho u_i'' y_l''}$ est assimilé à de la diffusion turbulente de la masse de liquide.

$$\widetilde{u_i'' y_l''} = - \frac{\nu_t}{Sc_t} \frac{\partial \widetilde{Y}_l}{\partial x_i} \quad (5.1)$$

Cette fermeture au premier ordre donne des résultats tout à fait satisfaisants dans le cas d'un mélange de deux gaz de densités équivalentes. Dans ce type de mélange, le flux turbulent est donc entièrement contrôlé par les gradients de fraction massique et la diffusion turbulente de la vitesse.

Beau [84, 85] présente dans sa thèse un cas simple mettant en évidence les limitations d'une telle approche. Le raisonnement est basé sur la relation exacte suivante, obtenue pour des phases dispersées telles que du liquide évoluant dans du gaz :

$$\widetilde{u_i'' y_l''} = \tilde{Y}_l (1 - \tilde{Y}_l) \left(\overline{u_{\tilde{Y}_l, i}|_l} - \overline{u_i|_g} \right) = \tilde{Y}_l \left(\overline{u_{\tilde{Y}_l, i}|_l} - \tilde{u}_i \right) \quad (5.2)$$

Dans cette relation, $\overline{u_{\tilde{Y}_l, i}|_l}$ et $\overline{u_i|_g}$ correspondent respectivement aux vitesses moyennes conditionnées aux phases liquide et gaz. La relation 5.2 met clairement en évidence le fait que le terme de flux turbulent est fortement lié au différentiel de vitesse entre les deux phases.

En s'intéressant à un nuage de gouttes agitées d'une vitesse moyenne Δu , d'un mouvement turbulent et évoluant dans un gaz en moyenne au repos (cf figure 3.2), les limites d'une fermeture basée sur une loi gradient sont atteintes rapidement.

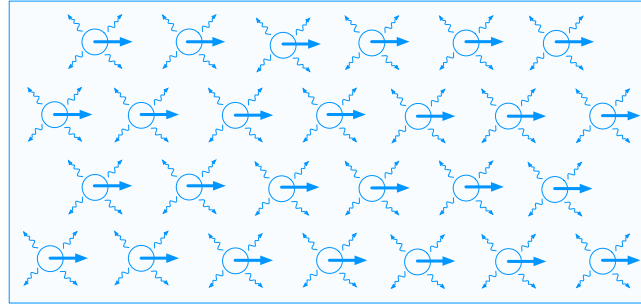


FIG. 5.1 – Représentation schématique d'un nuage de gouttes agitées d'une vitesse moyenne Δu et d'un mouvement turbulent dans un gaz en moyenne au repos

En effet, ce type de situation met en évidence un paradoxe entre le comportement d'une fermeture de type loi gradient et le résultat obtenu à l'aide de la relation exacte 5.2 :

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{Y}_l \neq 0 \\ \overline{u_{\tilde{Y}_l, i}|_l} - \overline{u_i|_g} = \Delta u \neq 0 \\ \frac{\partial \tilde{Y}_l}{\partial x_i} = 0 \end{array} \right. \quad \text{or :} \quad \left\{ \begin{array}{l} \widetilde{u_i'' y_l''} = \tilde{Y}_l (1 - \tilde{Y}_l) \left(\overline{u_{\tilde{Y}_l, i}|_l} - \overline{u_i|_g} \right) = \tilde{Y}_l (1 - \tilde{Y}_l) \Delta u \neq 0 \\ \widetilde{u_i'' y_l''} = -\frac{\nu_t}{Sc_t} \frac{\partial \tilde{Y}_l}{\partial x_i} = 0 \end{array} \right.$$

Ces observations sont tout de même à tempérer dans le sens où, après un certain temps, le gaz se mettra lui-même en mouvement sous l'effet de la traînée occasionnée par le mouvement des gouttes. Face à ce constat, Beau [84, 85] étudie le choix d'une fermeture au second ordre de ce flux turbulent, basée sur un jeu d'équations de transport pour les trois composantes du terme $\widetilde{u_i'' y_l''}$.

5.2 Fermeture au second ordre

Durant sa thèse, Beau [84, 85] s'intéresse à une fermeture au second ordre du flux turbulent de liquide $\widetilde{u_i''y_l''}$. Pour cela, deux voies sont explorées. La première consiste à considérer le milieu liquide/gaz comme un mélange de deux gaz et d'appliquer un modèle de turbulence à densité variable pour la fermeture des équations. Dans cette approche, il reprend les travaux proposés initialement par Bailly *et al.* [106] en 1987. La seconde vient d'approches multiphasiques (un jeu d'équations de transport pour la phase liquide, un autre jeu d'équations pour la phase gaz). Elle est basée sur les travaux de Drew [107] en 1983 puis ceux de Simonin [36] en 2000. Le modèle *ELSA* étant un modèle de mélange liquide/gaz, Beau montre dans sa thèse l'équivalence mathématique entre l'approche multiphasique utilisée par Drew et Simonin et son approche "quasi multiphasique" qui modélise le flux $\widetilde{u_i''y_l''}$ comme un flux de glissement entre les phases.

Le but de ce paragraphe est de présenter les principales caractéristiques de ces deux approches qui ont déjà été couplées avec le modèle *ELSA*, à savoir le modèle de Bailly *et al.* [106] et celui de Beau *et al.* [84, 85].

5.2.1 Modèle monophasique de turbulence à densité variable

Comme explicité plus haut, le modèle présenté ici est issu des travaux de Bailly *et al.* [106]. Dans ses travaux, un modèle au second ordre pour décrire les phénomènes de combustion turbulente prémélangée est proposé. Il y apparaît une équation de transport pour la variable d'avancement moyenne. Or, une analogie peut être envisagée entre cette variable d'avancement moyenne en combustion et la fraction massique de liquide du modèle *ELSA* pour les écoulement diphasiques.

Après une étude détaillée de ce modèle, Beau propose une écriture simplifiée du modèle de Bailly, en négligeant certains termes source estimés comme non significatifs dans le cas de jets liquides haute vitesse.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \widetilde{\rho u_i''y_l''}}{\partial t} + \frac{\partial \widetilde{\rho u_j''u_i''y_l''}}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{Sc_t} \frac{\partial \widetilde{u_i''y_l''}}{\partial x_j} \right) \\ &- C_{1,1} \widetilde{\rho u_j''y_l''} \frac{\partial \widetilde{u_i}}{\partial x_j} - C_{1,2} \widetilde{\rho u_i''u_j''} \frac{\partial \widetilde{Y_l}}{\partial x_j} - C_{1,3} \frac{\widetilde{\rho u_i''y_l''}}{\tau_t} \end{aligned} \quad (5.3)$$

Avec :

$$C_{1,1} = 1 \quad C_{1,2} = 0.5 \quad C_{1,3} = 5 \quad (5.4)$$

Dans cette équation, le terme de diffusion turbulente du flux turbulent $\widetilde{u_i''y_l''}$ est modélisé par une loi gradient.

Le premier terme source, qui est pondéré par la constante de modélisation $C_{1,1}$, modélise les effets de gradient de vitesse sur le flux turbulent de liquide.

Le second terme source, couplé avec la constante de modélisation $C_{1,2}$, modélise quant à lui les effets de gradient de fraction massique moyenne de liquide sur le flux turbulent de liquide.

Le dernier terme source, avec la constante de modélisation $C_{1,3}$, représente les effets dissipatifs de la turbulence sur le flux turbulent de liquide. Cette écriture suppose ainsi que le retour à l'équilibre du flux turbulent de liquide est piloté par un temps caractéristique choisi comme étant un temps turbulent τ_t .

Ce modèle ayant été initialement proposé pour l'étude de deux gaz de densités différentes, le choix d'un temps turbulent comme temps de rappel à l'équilibre peut paraître tout à fait légitime. Pour le cas de deux phases distinctes et plus particulièrement pour un cas diphasique liquide/gaz, utiliser un temps turbulent reviendrait à considérer que le glissement entre la phase liquide et la phase gaz serait contrôlé par la turbulence. C'est tout à fait envisageable pour un mélange liquide/gaz sans inertie, là où l'agitation turbulente est prépondérante. Cependant, pour les sprays liquides injectés à haute vitesse, cette approche pourrait se révéler être limitante, négligeant ainsi les effets de traînée. Dans cette optique, Beau s'est intéressé à une autre fermeture du flux turbulent, basée sur la modélisation de ce glissement entre phases *via* un temps de traînée.

5.2.2 Modèle “quasi multiphasique” de glissement entre phases

Ce modèle s'inscrit donc dans l'optique de modéliser le terme de flux de turbulent de liquide comme un terme de glissement entre les phases liquide et gaz. Beau propose ainsi durant sa thèse une fermeture originale de ce flux turbulent, en s'inspirant des approches diphasiques développées par Ishii [96, 97] en 1975, Drew [107] en 1983 puis Simonin [36] en 2000. Pour arriver à une écriture simplifiée de l'équation de transport du flux turbulent de liquide, Beau pose comme hypothèses de négliger les effets de collisions et de pression sur le flux turbulent, de considérer les contraintes visqueuses comme négligeables devant les contraintes turbulentes et enfin de ne considérer que des cas sans vaporisation.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \widetilde{\rho u_i'' y_l''}}{\partial t} + \frac{\partial \widetilde{\rho u_j'' u_i'' y_l''}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{Sc_t} \frac{\partial \widetilde{u_i'' y_l''}}{\partial x_j} \right) \\ - C_{2,1} \widetilde{\rho u_j'' y_l''} \frac{\partial \widetilde{u_i}}{\partial x_j} - C_{2,2} \widetilde{\rho u_i'' u_j''} \frac{\partial \widetilde{Y_l}}{\partial x_j} - \frac{C_{1,3}}{\tau_p (1 - \widetilde{Y_l})} \left(\widetilde{\rho u_i'' y_l''} + \widetilde{\rho} D_{lg,t} \frac{\partial \widetilde{Y_l}}{\partial x_i} \right) \end{aligned} \quad (5.5)$$

Avec :

$$C_{2,1} = 1 \quad C_{2,2} = 1 \quad C_{2,3} = 4 \quad (5.6)$$

L'équation de transport 5.5 a une écriture relativement similaire à celle présentée en relation 5.3. Seul le dernier terme source diffère. En effet, en lieu et place du temps caractéristique de turbulence comme temps de rappel à l'équilibre, l'approche présentée ici propose un temps de traînée τ_p . De plus, il est introduit ici un coefficient de dispersion liquide/gaz adapté :

$$D_{gl,t} = \widetilde{k} \left(C_\mu \tau_t - \frac{2}{3} (1 - \widetilde{Y_l}) \tau_p \right) \quad (5.7)$$

Ce coefficient de dispersion est défini de telle sorte que le flux turbulent dégénère vers une loi gradient lorsque le temps de traînée τ_p tend vers zéro ou lorsque le glissement moyen disparaît. Le

temps caractéristique de traînée est défini à partir de la loi de Schiller - Naumann :

$$\frac{1}{\tau_p} = \frac{18\rho_g\nu_g}{\rho_l} \frac{1}{d_l^2} \left(1 + 0.15 \left(\frac{u_{r,i}d_l}{\nu_g} \right)^{0.687} \right) \quad (5.8)$$

avec ν_g la viscosité du gaz, d_l le diamètre moyen dans la cellule et $u_{r,i}$ la vitesse relative liquide/gaz, définie ainsi :

$$u_{r,i} = \frac{1}{\bar{\rho}\tilde{Y}_l(1 - \tilde{Y}_l)} \left(\widetilde{\bar{\rho}u_i''y_l''} + \bar{\rho}D_{gl,t}\frac{\partial\tilde{Y}_l}{\partial x_i} \right) \quad (5.9)$$

Ce modèle introduit donc le phénomène physique de glissement entre phases, par l'intermédiaire d'un temps de traînée. Ainsi, par le biais de ce type de fermeture, l'équation de transport de la fraction massique de liquide $\tilde{Y}_l$ (relation 3.7) est couplée avec celle de la densité massique d'interface liquide/gaz $\tilde{\Omega}$ (relation 3.19), de par l'introduction du diamètre moyen d_l dans la fermeture du flux turbulent de liquide $\widetilde{u_i''y_l''}$.

Beau démontre de plus qu'une telle approche "quasi multiphasique" est rigoureusement équivalente à une approche multiphasique, grâce à l'exactitude de la relation 5.2.

Approche multiphasique	Approche "quasi multiphasique"
3 équations pour $\overline{u_i} _l$	3 équations pour $\tilde{u}_i = \tilde{Y}_l\overline{u_i} _l + (1 - \tilde{Y}_l)\overline{u_i} _g$
3 équations pour $\overline{u_i} _g$	3 équations pour $\widetilde{u_i''y_l''} = \tilde{Y}_l(1 - \tilde{Y}_l)(\overline{u_i} _l - \overline{u_i} _g)$
1 équation pour $\bar{\rho}_l\bar{Y}_l$	1 équation pour $\bar{\rho}\tilde{Y}_l$

TAB. 5.1 – Equivalence entre les approches multiphasique et "quasi multiphasique"

Le tableau 5.1 illustre ainsi que ces deux approches consistent à utiliser le même nombre d'équations de transport. Les modèles multiphasiques sont basés sur deux jeux d'équations, un par vitesse de phase, et une équation de transport pour la fraction de liquide. Le modèle "quasi multiphasique" de Beau [84, 85] est constitué d'un jeu d'équation de transport pour la vitesse moyenne du mélange liquide/gaz, et un jeu d'équations pour le transport des trois composantes de flux turbulent de liquide, caractérisant ainsi le phénomène de glissement entre les deux phases. Enfin, ce modèle "quasi multiphasique" inclut lui aussi une équation de transport pour la fraction de liquide, mais cette fois-ci en moyenne de Favre, avec une densité de mélange liquide/gaz.

A l'utilisation, ce modèle donne des résultats intéressants en terme de dispersion du liquide. En effet, la prise en compte du phénomène de traînée dans le transport de la fraction massique de liquide a tendance à allonger le jet dans l'axe d'injection et à légèrement diminuer l'angle du spray. Toutefois, les effets sont peu significatifs à l'échelle d'un jet liquide haute vitesse, où le mouvement moyen du mélange liquide/gaz joue un rôle prépondérant devant le glissement.

Pour l'étude présentée dans ce manuscrit, une méthode originale de fermeture du flux turbulent est proposée et décrite dans le paragraphe qui suit. Elle consiste en une utilisation des deux formalismes : eulérien et lagrangien, couplés entre eux.

5.3 Fermeture hybride Euler - Lagrange

Ce paragraphe présente une méthode utilisée pendant cette étude pour modéliser le flux turbulent de liquide. Cela passe par une description du contexte d'étude et des raisons pour lesquelles il a été décidé de combiner les formalismes eulérien et lagrangien. Ensuite, l'approche en elle-même est détaillée.

5.3.1 Contexte d'étude

Historiquement le modèle *ELSA* a été proposé par Vallet et Borghi [79, 80]. A l'époque, l'idée était de proposer un modèle de mélange liquide/gaz basé sur un formalisme eulérien pour les sprays à hauts nombres de Weber et de Reynolds. Cette approche eulérienne était utilisée en zone dense et en zone diluée du jet liquide.

Le prolongement de cette étude a fait l'objet d'une autre thèse de doctorat, celle de Blokkeel [81, 82], dans un contexte industriel qui nécessitait l'implémentation du modèle *ELSA* dans le logiciel de *CFD* utilisé à l'époque par PSA Peugeot - Citroën, Renault et l'IFP (*Institut Français du Pétrole*) à savoir KIVA-II GSM.

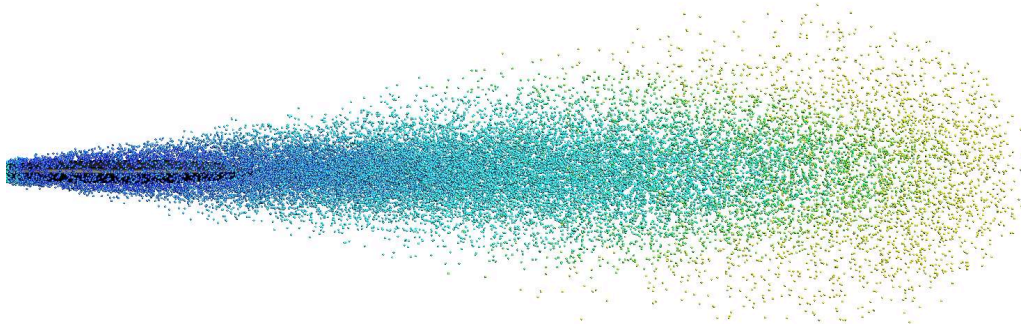


FIG. 5.2 – Proposition de Blokkeel pour l'utilisation du modèle : zone dense décrite par un formalisme eulérien (représentée ici par une iso-surface noire de fraction volumique à 10%) et zone diluée décrite par un formalisme lagrangien (les particules stochastiques sont colorées ici de façon à représenter le diamètre des gouttes)

Partant du principe que le modèle *ELSA* avait été initialement développé pour prendre en compte la zone dense de liquide près du nez de l'injecteur, Blokkeel propose dans sa thèse de considérer un formalisme eulérien calqué sur l'étude de Vallet *et al.* [79, 80] pour la zone dense du jet liquide et un formalisme lagrangien une fois ce spray considéré comme suffisamment dilué (voir la figure 5.2). Un critère de dilution basé sur une valeur de fraction volumique de liquide est ainsi introduit : pour des fractions volumiques inférieures à 50%, le spray est représenté sous forme lagrangienne.

Hormis le fait que cette valeur de fraction volumique soit encore trop importante pour utiliser la théorie lagrangienne, l'idée de départ était de s'intégrer au mieux dans la chaîne de modélisation de

la combustion diphasique dans un logiciel de *CFD* comme KIVA-II. En effet, dans ce type de code, l'injection de carburant est habituellement modélisée par une approche lagrangienne (voir la partie 2.1.2 du manuscrit). Les modèles de vaporisation sont donc implémentés de telle façon qu'il y ait un intérêt notable à intégrer le modèle *ELSA* avant l'appel aux *routines* d'évaporation du carburant. De fait, basculer vers une approche lagrangienne en zone diluée du jet constitue un avantage important : le lien est facilement fait entre l'injection du carburant, la vaporisation, le mélange et enfin la combustion dans la chambre.

Une fois le critère de transition choisi, cela permet de définir une "iso-surface", par exemple pour une fraction volumique constante. Sur cette iso-surface constituée de cellules, trois grandeurs eulériennes sont utilisées pour initialiser les particules lagrangiennes.

Le diamètre moyen de Sauter D_{32} :

$$D_{32} = \frac{6\tilde{Y}_l}{\rho_l\tilde{\Omega}} \quad (5.10)$$

Le nombre de gouttes par unité de volume n_d , qui donne le nombre de gouttes par particule stochastique n_p :

$$n_d = \frac{\rho_l^2\tilde{\rho}\tilde{\Omega}^3}{36\pi\tilde{Y}_l^2} \quad \text{donc :} \quad n_p = \frac{V_{cell}}{n_{util.}} \frac{\rho_l^2\tilde{\rho}\tilde{\Omega}^3}{36\pi\tilde{Y}_l^2} \quad (5.11)$$

Les trois composantes de la vitesse du liquide $\overline{u_i}|_l$:

$$\overline{u_i}|_l = \tilde{u}_i + \frac{\widetilde{u_i''y_l''}}{\tilde{Y}_l} \quad (5.12)$$

Ainsi chaque particule lagrangienne créée dans la cellule considérée de volume V_{cell} , aura un diamètre moyen D_{32} , avec des composantes de vitesse $\overline{u_{l,i}}$ et elle traduira le comportement de n_p gouttes liquides. Cette valeur est une valeur réelle et correspond en fait à une probabilité de présence de gouttes liquides.

Une donnée utilisateur est nécessaire : le nombre de particules stochastiques créées par cellule $n_{util.}$ de l'interface de transition Euler - Lagrange. A l'utilisation, il s'avère que $n_{util.} = 1$ est une valeur tout à fait satisfaisante dans le sens où la zone de transition Euler - Lagrange est constituée d'un nombre déjà suffisamment important de cellules, de par le raffinement du maillage nécessaire à l'utilisation du modèle *ELSA*. Ainsi, si l'on considère l'ensemble des cellules de transition, une distribution de particules stochastiques est initialisée et est tout à fait représentative du spray étudié. De plus, avec le formalisme actuel, il est possible d'introduire plus d'une particule par cellule de transition, voire une distribution de particules mais le temps de calcul ainsi que des contraintes liées à l'allocation mémoire nécessaire sont des critères limitants.

Enfin, ces particules sont positionnées de façon pseudo-aléatoire dans la cellule de transition considérée. Si des particules sont déjà présentes dans la cellule (elle peuvent venir d'une cellule de transition voisine ou être restées dans la cellule depuis le pas de temps précédent), on réinitialise leurs composantes vitesse ainsi que leur diamètre, tout en conservant leur position. Une mise à jour du nombre de classes est également effectuée. Pour une vue d'ensemble de la méthode, se référer à la figure 5.3.

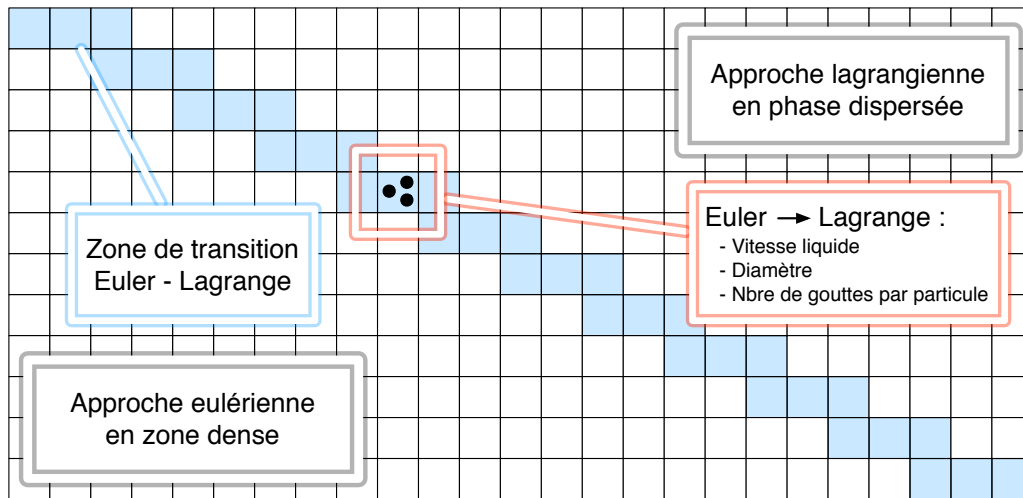


FIG. 5.3 – Schéma de principe de transition entre les approches eulérienne et lagrangienne selon Blokkeel et Beau

Problème de conservation de la masse Cette méthode proposée par Blokkeel et améliorée durant le début de thèse de Beau assure la conservation des quantités de masse et de mouvement lors du passage du formalisme eulérien au formalisme lagrangien. Les relations 5.10, 5.11 et 5.12 en sont l'expression. Au début de l'étude présentée dans ce manuscrit, cette méthode hybride a été implementée. A l'utilisation, le constat est mitigé : malgré l'écriture du formalisme précédemment décrit pour le passage de l'eulérien au lagrangien, il semble que la masse ne soit pas parfaitement conservée.

Cela vient d'une part du pas de temps, dans les codes de *CFD* utilisés dans l'industrie, les schémas numériques sont majoritairement implicites, ce qui permet l'utilisation de pas de temps conduisant à un critère de Courant - Friedrichs - Lewy (CFL) supérieur à un. La méthode implementée suppose que dans les cellules frontières une particule stochastique lagrangienne ne peut pas parcourir plus d'une cellule en un pas de temps. Ce critère n'est pas respecté pour des CFL supérieurs à un (voir figure 5.4).

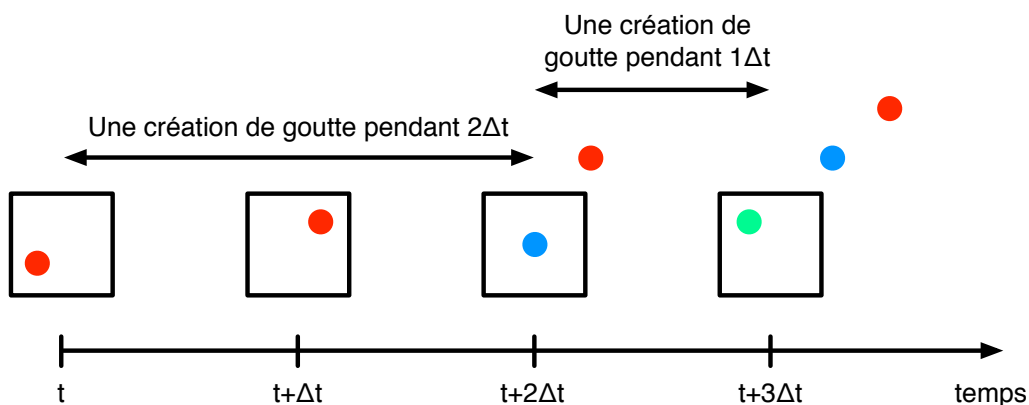


FIG. 5.4 – Illustration du problème de conservation de la masse à la frontière Euler - Lagrange

D'autre part, il est nécessaire de traiter le cas des gouttes rentrant dans la zone dense, soit par leur propre mouvement soit parce qu'elles sont rattrapées par la zone dense. Le cas échéant, la goutte est effacée.

Face à ce constat sur la conservation de la masse de liquide, la première et la plus simple des modifications à apporter serait un facteur correctif de masse ajouté devant la relation 5.11, prenant en compte le déficit de masse observé, à l'aide d'un bilan massique effectué à chaque pas de temps. Cette solution purement numérique est difficile à mettre en place dans l'optique d'une utilisation pratique du modèle *ELSA*. En effet, il faut ajouter de la masse localement alors que le bilan massique est global. Il a donc été décidé de s'orienter vers une autre approche. Le fait de changer de méthode a également été motivé par le constat suivant : les équations eulériennes sont résolues dans l'ensemble du domaine de calcul alors qu'elles ne sont utilisées qu'en zone dense pour initier la partie lagrangienne. De plus, le formalisme eulérien est résolu de façon conservative.

Le cheminement avant d'arriver à ce constat limitant de la méthode "Euler en zone dense - Lagrange en zone diluée" étant présenté, il justifie le choix d'une nouvelle approche, basée sur une méthode hybride de couplage en zone diluée du jet entre les approches eulérienne et lagrangienne. Cette méthode est détaillée dans le paragraphe qui suit.

5.3.2 Description de la méthode

Considérons le modèle *ELSA* sous sa forme présentée au chapitre 3. Ce modèle inclut donc un certain nombre d'équations qui transportent les variables suivantes : la fraction massique moyenne de liquide $\tilde{Y}_l$, la densité massique moyenne d'interface liquide/gaz $\tilde{\Omega}$, la fraction massique moyenne de vapeur de carburant $\tilde{Y}_v$ et enfin l'enthalpie massique moyenne du liquide $\tilde{h}_l$. Toutes ces équations de transport sont ainsi résolues dans l'ensemble du domaine de calcul. Ces variables sont considérées comme des valeurs moyennes de référence.

Cependant, une des limitations actuelles du modèle *ELSA* est qu'un seul diamètre moyen par cellule est transporté. Une distribution de taille de gouttes serait préférable. Pour cela, il est possible d'utiliser une fonction de distribution présumée qui est alors complètement déterminée par la connaissance de certains de ses moments. Ces moments sont alors calculés grâce aux équations de transport eulériennes. Marchisio et Fox [53, 54, 55, 56, 57, 58] explorent le sujet, notamment avec un modèle appelé *Direct Quadrature Method of Moments* ou "*DQMOM*". Comme son nom l'indique, il consiste à transporter différents moments d'une fonction de distribution de gouttes. Cependant, des difficultés subsistent pour ce type d'approches multi-classes et des travaux sont en cours pour prendre en compte la gestion des phénomènes de collisions, de coalescences ou d'évaporation des gouttes qui nécessitent une interaction entre les différentes classes. Par analogie avec ce type d'approches, le modèle *ELSA* transporte donc deux moments de la fonction de distribution : la masse de liquide dans la cellule donnée par la fraction massique moyenne de liquide et la surface d'échange entre le liquide et le gaz donnée par la densité massique moyenne d'interface liquide/gaz. Le transport de ces deux moments permet d'obtenir le diamètre moyen de Sauter D_{32} .

Le principe de la méthode de couplage Euler - Lagrange est le suivant : initialiser des particules lagrangiennes une fois le spray suffisamment dilué (comme le proposait déjà Blokkeel [81, 82] et Beau [84, 85]), faire en sorte à chaque pas de temps que masse et taille moyenne des gouttes dans chaque cellule de la zone diluée du jet coïncident entre les approches eulérienne et lagrangienne et enfin, prendre en compte les effets de la distribution de taille des particules lagrangiennes dans le terme de flux turbulent eulérien (dans le cas où plusieurs particules sont présentes dans la cellule considérée).

Cette méthode de couplage s'applique ici pour deux moments de la fonction de distribution : la fraction massique de liquide (masse des gouttes) et la densité massique moyenne d'interface liquide/gaz (taille des gouttes). Il est toutefois possible de généraliser cette approche pour d'autres termes comme le taux de vaporisation ou le flux de chaleur entre les phases liquide et gaz.

La méthode d'hybridation Euler - Lagrange est décrite ci-dessous, en deux étapes : d'abord le couplage dans le sens Euler vers Lagrange puis le couplage dans le sens Lagrange vers Euler. Les intérêts d'une telle méthode sont ensuite décrits.

5.3.2.1 Couplage Euler vers Lagrange

En formulation lagrangienne, il est possible de définir une fraction massique moyenne de liquide lagrangienne $\tilde{Y}_l^L$:

$$\tilde{Y}_l^L = \frac{1}{\bar{\rho}V_{cell}} \sum_k \rho_l n_k \frac{\pi}{6} D_k^3 \quad (5.13)$$

avec n_k le nombre de gouttes par particule stochastique indicée “ k ” de diamètre D_k .

De la même façon, une densité massique moyenne d'interface liquide/gaz lagrangienne peut être définie :

$$\bar{\rho}\tilde{\Omega}^L = \bar{\Sigma}^L = \frac{1}{V_{cell}} \sum_k n_k \pi D_k^2 \quad (5.14)$$

La première étape de cette méthode de couplage consiste à s'assurer, dans chaque cellule du domaine de calcul, que les approches eulérienne et lagrangienne transportent en moyenne la même quantité de masse de liquide ainsi qu'un diamètre moyen de Sauter équivalent. Si ce n'est pas le cas, un facteur correctif de masse est appliqué pour déterminer un nouveau nombre de gouttes par particule lagrangienne n_k^+ :

$$n_k^+ = \varepsilon_n n_k \quad (5.15)$$

ainsi qu'un facteur correctif pour le diamètre des particules lagrangiennes pour qu'elles aient un nouveau diamètre D_k^+ :

$$D_k^+ = \varepsilon_D D_k \quad (5.16)$$

La figure 5.5 représente de façon schématique en quoi consiste ces modifications au niveau de la distribution de taille des particules lagrangiennes. Une fois ces modifications faites, une nouvelle distribution de taille est obtenue. Elle peut être considérée comme une distribution de taille “hybride Euler - Lagrange”, dans le sens où elle possède un certain nombre d'informations venant de l'approche lagrangienne (écart-type autour du diamètre moyen de Sauter, forme générale de la distribution...) et elle possède le diamètre moyen de Sauter eulérien.

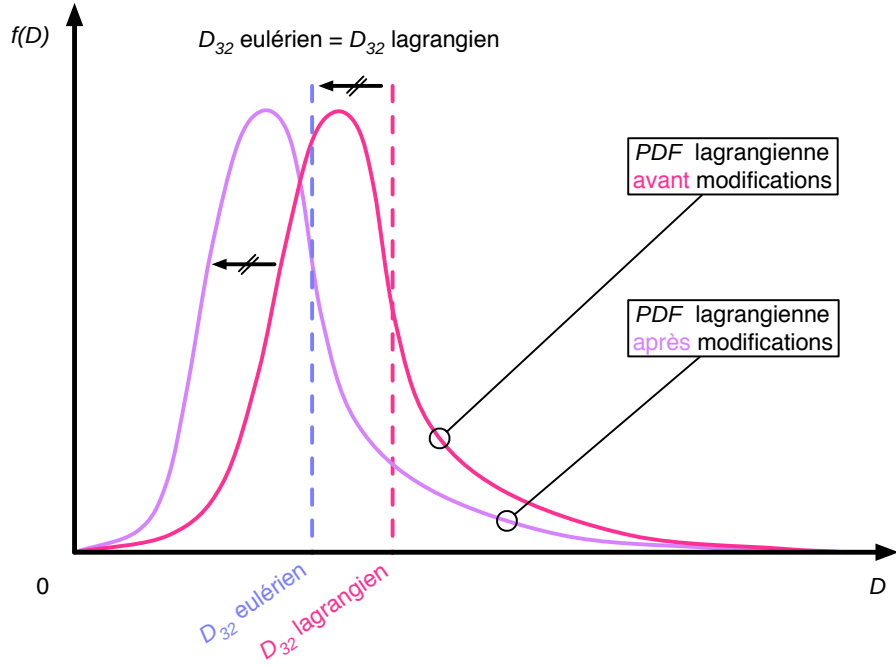


FIG. 5.5 – Principe de modification des distributions de taille de particules lagrangiennes en prenant comme référence le diamètre moyen de Sauter eulérien pour reconstruire une nouvelle distribution de taille hybride Euler - Lagrange

Il reste cependant à déterminer les coefficients multiplicatifs de masse et de taille de gouttes, respectivement ε_n et ε_D . En s'assurant que la masse lagrangienne est égale à la masse eulérienne et en égalisant les diamètres moyens de Sauter eulérien et lagrangien, il vient aisément :

$$\varepsilon_n = \left(\frac{\tilde{Y}_l}{\tilde{Y}_l^L} \right)^2 \left(\frac{\overline{\Sigma}^L}{\overline{\Sigma}} \right)^3 \quad (5.17)$$

$$\varepsilon_D = \frac{\tilde{Y}_l}{\tilde{Y}_l^L} \frac{\overline{\Sigma}^L}{\overline{\Sigma}} \quad (5.18)$$

A ce niveau, la méthode permet d'assurer un comportement identique de la modélisation lagrangienne et de la modélisation eulérienne en zone diluée du spray. Cela n'aurait alors que peu d'intérêts d'utiliser les deux approches, l'eulérienne se suffisant à elle-même, en zone dense et en zone diluée.

5.3.2.2 Couplage Lagrange vers Euler

L'intérêt d'une telle approche réside donc dans l'exploitation de cette distribution de taille hybride Euler - Lagrange pour fermer les termes inconnus des équations de transport eulériennes. Considérons donc l'équation de transport de la fraction massique moyenne de liquide :

$$\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{Y}_l}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{Y}_l \tilde{u}_i}{\partial x_i} = - \frac{\partial \tilde{\rho} \widetilde{u_i'' y_l''}}{\partial x_i} \quad (5.19)$$

Depuis le début de ce chapitre, il n'est question que du flux turbulent de liquide qui intervient dans la relation 5.19. Cependant, il est possible de généraliser l'approche au flux turbulent $\widetilde{u_i''x''}$ correspondant à une variable transportée $\widetilde{X}$. Par exemple, l'équation de transport de la densité massique moyenne d'interface liquide/gaz peut aussi être considérée :

$$\frac{\partial \widetilde{\rho\Omega}}{\partial t} + \frac{\partial \widetilde{\rho\Omega} \widetilde{u}_i}{\partial x_i} = - \frac{\partial \widetilde{\rho u_i'' \omega''}}{\partial x_i} \quad (5.20)$$

En se référant à la relation 5.2, il est tout à fait possible d'écrire de façon générique la relation exacte suivante :

$$\widetilde{u_i''x''} = \widetilde{X} \left(1 - \widetilde{X} \right) \left(\overline{u_{\widetilde{X},i}|_l} - \overline{u_i|_g} \right) = \widetilde{X} \left(\overline{u_{\widetilde{X},i}|_l} - \widetilde{u}_i \right) \quad (5.21)$$

De plus, ce flux turbulent $\widetilde{u_i''x''}$ peut très bien être défini de façon eulérienne, *via* le choix d'une fermeture au premier ou au second ordre, mais aussi de façon lagrangienne. En effet, il est tout à fait possible de calculer dans chaque cellule du domaine les vitesses $\overline{u_{\widetilde{Y}_l,i}|_l}$ et $\overline{u_{\widetilde{\Omega}_l,i}|_l}$ qui correspondent aux moyennes des vitesses pondérées respectivement par le volume et par la surface de liquide :

$$\overline{u_{\widetilde{Y}_l,i}|_l} = \frac{1}{V_{l,L}} \sum_k u_{l,i} n_k \frac{\pi}{6} D_k^3 \quad (5.22)$$

$$\overline{u_{\widetilde{\Omega}_l,i}|_l} = \frac{1}{S_{l,L}} \sum_k u_{l,i} n_k \pi D_k^2 \quad (5.23)$$

avec $V_{l,L}$ et $S_{l,L}$ respectivement le volume total et la surface totale de liquide sous forme lagrangienne dans la cellule considérée.

Une fois ces vitesses recueillies, les flux turbulents lagrangiens peuvent donc être déterminés en les exprimant ainsi :

$$\widetilde{u_i''y_l''}^L = \widetilde{Y}_l^L \left(\overline{u_{\widetilde{Y}_l,i}|_l} - \widetilde{u}_i \right) \quad (5.24)$$

$$\widetilde{u_i''\omega''}^L = \widetilde{\Omega}_l^L \left(\overline{u_{\widetilde{\Omega}_l,i}|_l} - \widetilde{u}_i \right) \quad (5.25)$$

En ce qui concerne les flux turbulents eulériens, un choix de fermeture est nécessaire. Par soucis de simplicité et de stabilité numérique, une fermeture au premier ordre basée sur une loi de Fick ou "loi gradient" est choisie, que ce soit pour le flux turbulent lié à $\widetilde{Y}_l$ mais aussi pour celui lié à $\widetilde{\Omega}$:

$$\widetilde{u_i''y_l''}^E = - \frac{\nu_t}{Sc_t} \frac{\partial \widetilde{Y}_l}{\partial x_i} \quad (5.26)$$

$$\widetilde{u_i''\omega''}^E = - \frac{\nu_t}{Sc_t} \frac{\partial \widetilde{\Omega}}{\partial x_i} \quad (5.27)$$

avec un nombre de Schmidt Sc_t pris égal à 1 pour les deux cas.

Comme explicité plus haut, le formalisme eulérien reste dans cette méthode de fermeture des flux turbulents la modélisation de référence, en zone dense comme en zone diluée du jet. Le principe consiste donc à ajouter, dans le cas d'une présence de particules lagrangiennes dans la cellule considérée, la contribution de l'approche lagrangienne dans le flux turbulent retenu pour être intégré dans les équations de transport 5.19 et 5.20. Cette contribution est caractérisée par la présence de la distribution

de taille hybride Euler - Lagrange (voir la figure 5.5). Selon la loi de traînée, une distribution de taille des gouttes liquides implique une distribution de vitesses. Cette distribution de vitesses a pour conséquence la prise en compte du phénomène de glissement entre les phases liquide et gaz. En effet, une fermeture au premier ordre des flux turbulents ne permet pas de capturer ce type de phénomène. L'exemple présenté par Beau au paragraphe 5.1 illustre très bien cette limitation.

Il reste donc à intégrer cette contribution lagrangienne dans l'évaluation des termes de flux turbulents. Afin de conserver le rôle de référence du formalisme eulérien, il a été décidé d'introduire une fonction de pondération entre l'approche eulérienne et l'approche lagrangienne. Si la cellule considérée ne contient pas plus d'une particule lagrangienne, les flux turbulents retenus doivent être intégralement ceux obtenus par le formalisme eulérien, sinon l'équilibre entre les deux approches sera dicté par le nombre de particules stochastiques n_p présentes :

Si $n_p \leq 1$ alors,

$$\widetilde{u''_i y''_l} = \widetilde{u''_i y''_l}^E \quad (5.28)$$

$$\widetilde{u''_i \omega''} = \widetilde{u''_i \omega''}^E \quad (5.29)$$

Sinon,

$$\widetilde{u''_i y''_l} = \frac{1}{\sqrt{n_p}} \widetilde{u''_i y''_l}^E + \left(1 - \frac{1}{\sqrt{n_p}}\right) \widetilde{u''_i y''_l}^L \quad (5.30)$$

$$\widetilde{u''_i \omega''} = \frac{1}{\sqrt{n_p}} \widetilde{u''_i \omega''}^E + \left(1 - \frac{1}{\sqrt{n_p}}\right) \widetilde{u''_i \omega''}^L \quad (5.31)$$

Cette fonction de pondération exprime le fait que l'erreur due à la convergence statistique est proportionnelle à $1/\sqrt{n_p}$. Par exemple, cette répartition des poids entre les deux formalismes implique qu'à partir de quatre particules dans une cellule, l'approche lagrangienne du modèle intervient à 50% dans la fermeture des flux turbulents $\widetilde{u''_i y''_l}$ et $\widetilde{u''_i \omega''}$.

En ce qui concerne le critère de dilution qui définit intrinsèquement la zone de création des particules lagrangiennes, dans les différents tests effectués durant cette étude, une valeur de fraction volumique moyenne de liquide de 10% semble être un bon compromis. Cela correspond tout à fait aux spécifications imposées par le formalisme lagrangien. Dans le chapitre 6, deux autres essais seront cependant effectués, l'un avec un critère de dilution à 1%, l'autre à 5%, afin de quantifier l'effet d'un tel critère sur la topologie du spray dans son ensemble quand cette méthode de fermeture des flux turbulents est activée.

Une nouvelle approche pour la fermeture des flux turbulents intervenant dans les équations de transport de la fraction massique moyenne de liquide et de la densité massique moyenne d'interface liquide/gaz est proposée. Elle se base sur une utilisation couplée des approches eulérienne et lagrangienne en zone diluée du jet. Dans chaque cellule, en s'assurant de la bonne conservation de la masse de liquide ainsi que du diamètre moyen de Sauter, l'approche lagrangienne permet d'obtenir une distribution de taille de gouttes liquides hybride Euler - Lagrange. Or, selon la loi de traînée qui régit en partie le comportement des gouttes liquides en mouvement dans un gaz, une distribution de taille de

gouttes implique une distribution de vitesses. Ainsi, par cette méthode, la notion de glissement entre les phases liquide et gaz est introduite dans les flux turbulents $\widetilde{u_i''y_l''}$ et $\widetilde{u_i''\omega''}$.

Cette méthode s'inscrit donc dans une suite logique de ce qui a été proposé précédemment pour la fermeture du flux turbulent de liquide (Bailly *et al.* [106] puis Beau *et al.* [84, 85]), en intégrant le phénomène physique de glissement entre phases, jusqu'à présent absent lorsqu'une loi gradient est utilisée pour fermer le terme de flux turbulent. De plus, cette hybridation Euler - Lagrange permet d'aller un peu plus loin en introduisant une distribution de taille de gouttes plutôt qu'un diamètre moyen de Sauter (distribution en pic de Dirac) par cellule du domaine de calcul. Cependant, le couplage n'est présent qu'au niveau des flux turbulents $\widetilde{u_i''y_l''}$ et $\widetilde{u_i''\omega''}$. D'une manière générale, tout modèle eulérien a son pendant lagrangien. Il serait donc envisageable d'établir un couplage entre les formalismes eulérien et lagrangien au niveau d'autres termes comme le taux de vaporisation, le flux de chaleur entre phases liquide et gaz ou au niveau des sous-modèles d'atomisation secondaire et de collisions/coalescences.

Utiliser l'approche lagrangienne que proposent les logiciels de *CFD* permettra aussi à l'avenir de s'affranchir de certaines difficultés liées à l'impact des jets aux parois du piston ou aux interactions fortes entre sprays. En effet, des modèles de collisions spécifiques à ce type de problèmes existent déjà dans la littérature et pourraient être intégrés dans le modèle *ELSA* par le biais de telles approches de couplage Euler - Lagrange.

Chapitre 6

Validations du modèle *ELSA* - Applications et Résultats

Ce chapitre présente les différents résultats obtenus pour valider le modèle *ELSA*. Tous les calculs proposés ici ont été obtenus avec le même jeu d'équations de transport ainsi que les mêmes constantes de modélisation. Se référer aux chapitres 3, 4 et 5 pour une description détaillée du modèle. Un récapitulatif des modélisations retenues par la suite est présenté en planche P.6.0.1..

En premier lieu, des comparaisons quantitatives sont présentées entre une simulation numérique directe de Ménard *et al.* [21] et le modèle *ELSA*, dans une zone de calcul restreinte près de la buse d'injection.

Ensuite, différents essais sont proposés dans le but de quantifier l'impact de certains aspects numériques ou physiques sur la topologie du spray comme le fait d'activer ou non le couplage Euler - Lagrange en zone diluée du jet, l'intensité turbulente en sortie d'injecteur, le niveau de finesse des maillages utilisés ou encore la prise en compte du phénomène de rupture secondaire. Tous ces essais sont réalisés "à froid", dans le sens où les phénomènes de vaporisation n'agissent pas sur le jet. La température du gaz environnant est identique à celle du liquide et proche des conditions atmosphériques, donc très inférieur à la température d'ébullition.

Pour valider le modèle dans des applications moteur, des cas de validations sont présentés pour des conditions expérimentales similaires à celles observées dans une chambre de combustion Diesel, c'est-à-dire des sprays haute pression vaporisant dans un environnement à température et contre-pression élevées. Le modèle de vaporisation intégré dans *ELSA* peut ainsi être validé en comparant les pénétrations liquide et vapeur obtenues numériquement aux mesures expérimentales.

Enfin, des calculs sont réalisés en conditions réactives, le modèle *ELSA* étant alors couplé avec un modèle de combustion développé par l'IFP dans le cadre du GSM (pour *Groupe Scientifique Moteur*). Des tests *a priori* sur l'impact de la taille du trou de l'injecteur sont d'abord présentés. Ensuite, des comparaisons avec des résultats expérimentaux obtenus par chimiluminescence OH sont proposés concernant les distances de *lift - off* ainsi que la forme des flammes obtenues.

Masse :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad \text{avec :} \quad \frac{1}{\bar{\rho}} = \frac{\tilde{Y}_l}{\rho_l} + \frac{1 - \tilde{Y}_l}{\rho_g} \quad \text{avec :} \quad \rho_l = f(T_l) \quad \text{et} \quad \rho_g = \frac{P}{r T_g}$$

Quantité de mouvement :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_j} = - \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} - \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i'' \tilde{u}_j''}{\partial x_j}$$

Turbulence :

$$\widetilde{u_i'' u_j''} = -\nu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) + \frac{2}{3} \tilde{k} \delta_{ij} \quad \text{avec :} \quad \nu_t = C_\mu \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\varepsilon}} \quad \text{et} \quad C_\mu = 0.09$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{k}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{k} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{Sc_{t,k}} \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_i} \right) + P_k - \bar{\rho} \tilde{\varepsilon}$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\varepsilon}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\varepsilon} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{Sc_{t,\varepsilon}} \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x_i} \right) + C_{\varepsilon,1} \bar{\rho} P_k \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} - C_{\varepsilon,2} \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}^2}{\tilde{k}} + C_{\varepsilon,3} \bar{\rho} \tilde{\varepsilon} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k}$$

$$\text{avec :} \quad C_{\varepsilon,1} = 1.44 \quad C_{\varepsilon,2} = 0.33 \quad C_{\varepsilon,3} = 1.92$$

Dispersion du liquide :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_l}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_l \tilde{u}_i}{\partial x_i} = - \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i'' \tilde{y}_l''}{\partial x_i} - \bar{\rho} \dot{\tilde{Y}}_{l,v} \quad \text{avec :} \quad \bar{\rho} \dot{\tilde{Y}}_{l,v} = \bar{\rho} \dot{m}_{v,ELSA} \tilde{\Omega}$$

Densité d'interface liquide/gaz :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\Omega}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{\Omega}}{\partial x_j} = & - \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i'' \tilde{\omega}''}{\partial x_i} + \Psi \left[\alpha_1 \frac{12 \bar{\rho} \mu_t}{\rho_l \rho_g Sc_t L_t} \frac{\partial \tilde{Y}_l}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{Y}_l}{\partial x_i} - \alpha_2 \frac{\bar{\rho} \tilde{\Omega}}{\tau_t} \left(1 - \frac{\tilde{\Omega}}{\tilde{\Omega}_{crit,1}} \right) \right] \\ & + (1 - \Psi) \left[\alpha_3 \frac{\bar{\rho} \tilde{\Omega}}{\tau_{coll}} \left(1 - \frac{\tilde{\Omega}}{\tilde{\Omega}_{crit,2}} \right) + \alpha_4 \frac{\bar{\rho} \tilde{\Omega}}{\tau_{2ndBU}} \left(1 - \frac{\tilde{\Omega}}{\tilde{\Omega}_{crit,3}} \right) \right] + \alpha_5 \frac{2}{3} \frac{\bar{\rho} \tilde{\Omega}^2}{\tilde{Y}_l} \dot{m}_{v,ELSA} \end{aligned}$$

$$\tilde{\Omega}_{crit,1} = f(We_{crit,1}) \quad \text{avec :} \quad We_{crit,1} = 1 \quad (\text{relations 4.47 et 4.48})$$

$$\tilde{\Omega}_{crit,2} = f(We_{crit,2}) \quad \text{avec :} \quad We_{crit,2} = 12 \quad (\text{relations 4.50, 4.51 et 4.52})$$

$$\tilde{\Omega}_{crit,3} = f(We_{crit,3}) \quad \text{avec :} \quad We_{crit,3} = f(Oh) \quad (\text{relations 4.57 et 4.58})$$

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = \alpha_4 = \alpha_5 = 1$$

Echanges thermique et massique entre le liquide et le gaz :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_v}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_v \tilde{u}_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{Sc_t} \frac{\partial \tilde{Y}_v}{\partial x_j} \right) + \bar{\rho} \dot{\tilde{Y}}_{l,v}$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_l \tilde{h}_l}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_l \tilde{h}_l \tilde{u}_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial \tilde{Y}_l \tilde{h}_l}{\partial x_j} \right) + \frac{\bar{\rho} Q_L \rho_l^2 \tilde{\Omega}^3}{36 \pi \tilde{Y}_l^2} - \bar{\rho} \dot{m}_{v,ELSA} \tilde{\Omega} \tilde{h}_l$$

P.6.0.1. - Récapitulatif des modélisations retenues par la suite pour le modèle *ELSA* - les nombres adimensionnels de Schmidt et de Prandtl sont pris égaux à 1

6.1 Comparaisons DNS - *ELSA* près de l'injecteur

Cette première partie de l'étude est une comparaison entre une simulation numérique directe de Ménard *et al.* [21] et le modèle *ELSA*. Pour comprendre les résultats, il est nécessaire de décrire les méthodes numériques utilisées pour la simulation numérique directe des écoulements liquide/gaz avec suivi de l'interface.

6.1.1 Principes des méthodes utilisées pour le suivi d'interface

La DNS utilisée à titre comparatif pour les calculs en zone dense d'un jet liquide s'appuie sur plusieurs méthodes numériques.

La première, nommée "*Level Set*", consiste à transporter une fonction interface ϕ entre deux phases distinctes [18]. Cette fonction ϕ est définie comme étant la distance algébrique entre un nœud du maillage et l'interface entre les deux phases. Ainsi la position de l'interface est identique à l'iso-surface 0 du champ ϕ . La résolution de l'équation de transport de cette fonction dans un champ de vitesse locale V détermine l'évolution de la position de l'interface entre les deux phases :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + V \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \quad (6.1)$$

Le principal avantage de cette méthode numérique réside dans le positionnement précis de l'interface entre les deux phases. Cependant, cette approche n'assure pas une conservation parfaite de la masse lors de la simulation d'écoulements fortement contraints.

La seconde méthode, intitulée "*VOF*" pour "*Volume Of Fluid*", s'appuie sur le transport d'une fraction volumique Y [17]. Une équation de transport pour cette variable est résolue, ce qui permet de déterminer la quantité exacte du fluide considéré dans chaque cellule du domaine de calcul.

$$\frac{\partial Y}{\partial t} + V \frac{\partial Y}{\partial x} = 0 \quad (6.2)$$

Contrairement à la méthode "*Level Set*", il existe pour la méthode *VOF* des schémas numériques assurant la conservation de la masse. Il est cependant plus délicat de localiser précisément l'interface entre les deux phases.

Ces deux méthodes s'appuient sur le champ de vitesse locale V (vitesse du liquide ou vitesse du gaz, en fonction de la position par rapport à l'interface). La DNS utilisée durant cette étude est basée sur les travaux de Tanguy et Berlemont [91, 108] pour la résolution des équations de Navier Stokes pour un milieu diphasique incompressible. Durant ces travaux, Tanguy propose d'utiliser la méthode "*Ghost Fluid*" [109] pour prendre en compte les fortes discontinuités à l'interface. Cette méthode permet de calculer précisément les dérivées de chaque côté de l'interface, en prenant en compte explicitement les conditions de saut.

Comparant les avantages et inconvénients des méthodes *Level Set* et *VOF*, certains auteurs comme Sussman en 2000 [110] se sont intéressés à un couplage entre ces deux approches, alliant ainsi les avantages tout en évitant les inconvénients. La méthode utilisée par Ménard *et al.* [21] s'inscrit dans cette approche, en couplant la méthode *VOF* pour assurer la conservation de la masse à la méthode *Level Set* pour localiser précisément l'interface.

6.1.2 Conditions de calcul

En ce qui concerne la DNS, la condition limite de turbulence en sortie d'injecteur a été générée à l'aide de la méthode de Klein [111] qui consiste à imposer des fluctuations de vitesses corrélées suivant une échelle de longueur. Pour le calcul présenté ici, dans le but de générer des conditions limites comparables à celles choisies en calcul *RANS*, il a été décidé de prendre comme échelle de longueur l'échelle intégrale turbulente $L_t = 0.1D_{inj}$, conformément à la valeur prise pour un écoulement dans un canal. De plus, l'intensité turbulente au niveau du trou de l'injecteur est fixée à 5%. Des améliorations sont possibles sur ce point mais la turbulence en sortie d'injecteur est très mal connue. En effet, il n'existe pas de mesures expérimentales ni de modèles théoriques du fait de la complexité de l'écoulement dans cette zone. En utilisant ce type de méthode, l'énergie cinétique turbulente k ainsi que l'échelle intégrale de turbulence L_t sont donc renseignées de la même façon, que ce soit pour la DNS comme pour le calcul effectué avec le modèle *ELSA*.

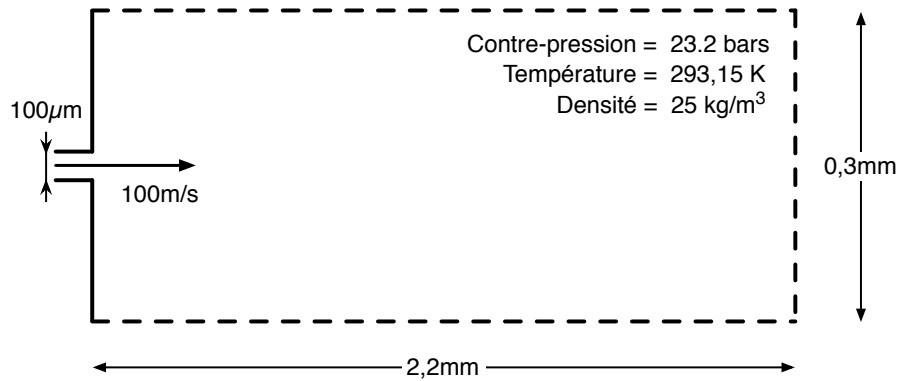


FIG. 6.1 – Dimensionnement du calcul de comparaison DNS - *ELSA*

La taille du domaine est donnée en figure 6.1 et les conditions de calcul sont détaillées dans le tableau 6.1.

Diamètre injecteur (μm)	Vitesse d'injection (m/s)	Intensité turbulente I_t	Longueur turbulente L_t
100	100	5%	$0.1D_{inj}$
Densité liquide (kg/m^3)	Densité gaz (kg/m^3)	Tension de surface (N/m)	Température liquide (K)
696	25	0.06	293.15K

TAB. 6.1 – Conditions détaillées du calcul de comparaison DNS - *ELSA*

Pour le calcul DNS, le nombre de mailles est 128 x 128 x 896. Ces mailles ont toutes la même taille Δx . La taille de maille est choisie de telle sorte que la simulation puisse décrire l'ensemble des

structures liquides. Pour cela, la tension de surface du dodécane a été augmentée à $\sigma_l = 0.06 \text{ N/m}$ afin de permettre aux gouttes de taille $2\Delta x$ d'avoir un nombre de Weber défini à partir de la vitesse d'injection u_{inj} :

$$We_l = \frac{\rho_l (2\Delta x) u_{inj}^2}{\sigma_l} \quad (6.3)$$

inférieur à un Weber critique donné : $We_{l,crit} = 10$.

En ce qui concerne le calcul effectué avec le modèle *ELSA*, deux maillages ont été testés afin de quantifier l'impact de la taille des mailles sur les résultats obtenus. Un exemple de ce type de maillage est proposé en figure 6.2. Dix mailles sont présentes le long du diamètre de l'injecteur et ce, pour les deux maillages, afin de s'assurer une représentation précise de l'écoulement en zone proche de l'injecteur. Le premier maillage est constitué de 63000 mailles (profils "ELSA - Lebas"), le second de 126000 mailles (profils "ELSA - Lebas (fin)"). De plus, les résultats issus de la thèse de Beau [84] (profils "ELSA - Beau") sont également restitués et comparés aux profils obtenus avec l'équation de transport de la densité d'interface liquide/gaz proposée dans cette étude. Les principales différences entre la modélisation proposée par Beau et celle présentée dans ce manuscrit résident dans le choix du code de calcul et dans l'équation de transport retenue pour la densité massique moyenne d'interface liquide/gaz. Pour plus de détails concernant l'approche de Beau, se référer au paragraphe 4.1.2.2.

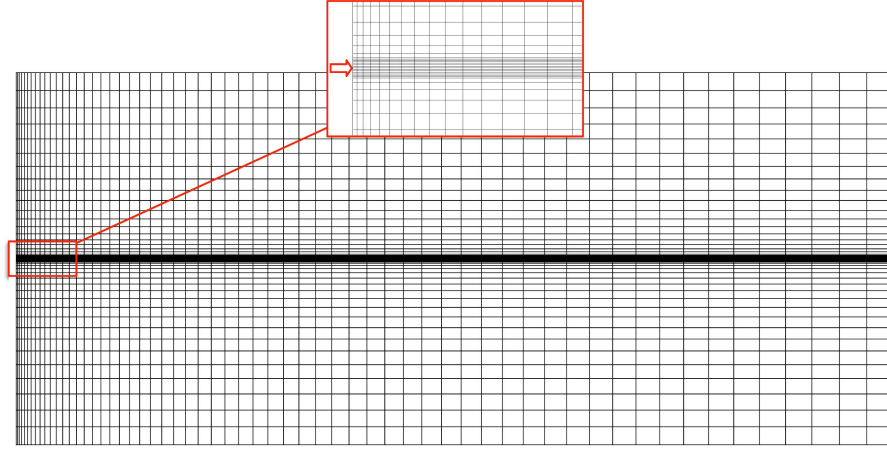


FIG. 6.2 – Maillage type utilisé pour le calcul de comparaison DNS - *ELSA*

Le modèle *ELSA* utilisé ici n'intègre pas le couplage Euler - Lagrange car ce calcul de comparaison avec la DNS ne concerne que la zone dense, proche de l'injecteur. De plus, l'équation de transport de la densité massique moyenne d'interface liquide/gaz est telle qu'elle a été présentée au paragraphe 4.2 du chapitre 4. Enfin, le cas présenté ici est un cas stationnaire.

Trois grandeurs sont étudiées : la fraction volumique moyenne de liquide ϕ_l , la densité d'interface liquide/gaz par unité de volume $\bar{\Sigma}$ et l'énergie cinétique turbulente moyenne du mélange liquide/gaz $\tilde{k}$. Des champs de valeurs sont présentés, respectivement aux figures 6.4, 6.5 et 6.6. De plus, des profils axiaux et radiaux sont extraits de ces champs (suivant la disposition présentée en figure 6.3) et comparés avec le calcul DNS. Les résultats sont proposés aux planches P.6.1.2., P.6.1.3. et P.6.1.4..

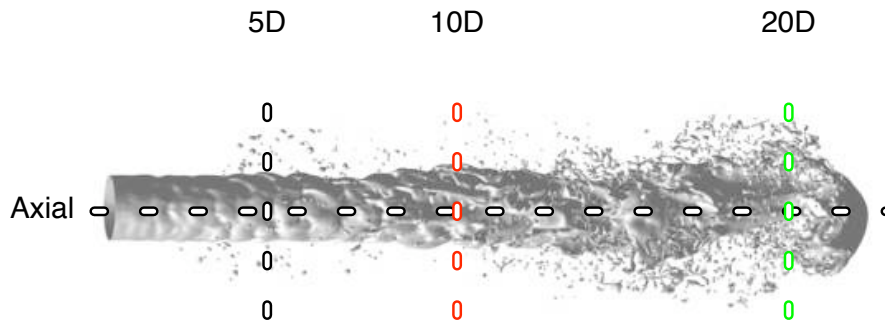


FIG. 6.3 – Disposition des différents profils extraits des résultats de DNS et du modèle *ELSA*

6.1.3 Etude comparative

La fraction volumique moyenne de liquide Les résultats obtenus avec le modèle *ELSA* sont en accord avec les calculs issus de la DNS en ce qui concerne le champ de fraction volumique moyenne de liquide (figure 6.4). L'utilisation d'une loi gradient pour le traitement du flux turbulent apparaît tout à fait satisfaisante dans la zone dense du spray pour déterminer la dispersion du liquide. Ces résultats sont confirmés par les profils présentés en figure P.6.1.2.. Cela signifie que dans la direction radiale, le flux turbulent correspond principalement à de la diffusion turbulente et que sur l'axe d'injection, même si un glissement moyen existe, ce flux reste dominé par la convection moyenne.

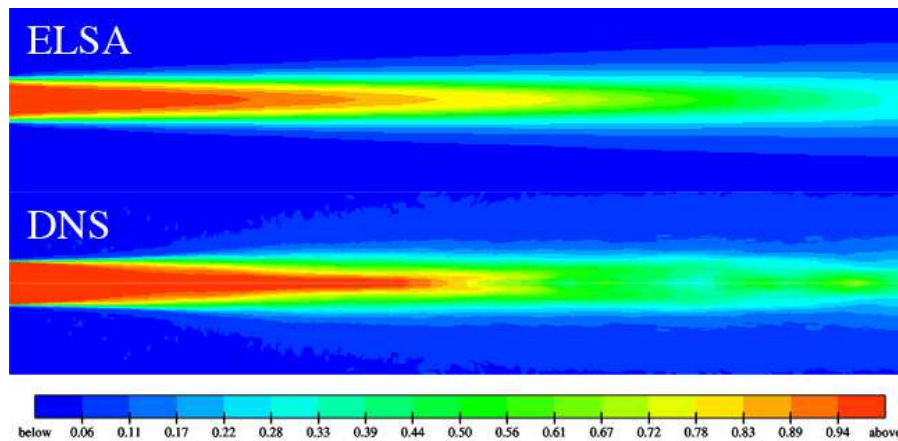


FIG. 6.4 – Champs de fraction volumique moyenne de liquide ϕ_l donnés par le modèle *ELSA* et par la DNS

De plus, on peut remarquer que l'influence du raffinement du maillage est négligeable et que le maillage le plus grossier suffit pour atteindre une convergence en espace. Il est à noter que les profils de fraction volumique obtenus avec le code AVL Fire sont relativement proches de ceux obtenus durant la thèse de Beau avec un autre code et un autre maillage.

Enfin, le modèle *ELSA* tend à sous-estimer légèrement la longueur de cœur liquide intact. En effet,

le profil axial de fraction volumique moyenne de liquide chute un peu tôt en comparaison avec le calcul DNS et les résultats obtenus par Beau durant sa thèse [84]. Cette différence pourrait être due à une diffusion numérique plus importante dans ces conditions avec le code utilisé dans cette étude. Dans tous les cas, un profil initial de fraction volumique de liquide en créneau reste difficile à transporter sans diffusion numérique.

La densité d'interface liquide/gaz par unité de volume La figure 6.5 présente les champs de densité d'interface liquide/gaz par unité de volume obtenus par la DNS et le modèle. Ces champs sont relativement proches. Lorsque l'on compare les profils obtenus (figure P.6.1.3.), on observe que les valeurs maximales ainsi que les tendances obtenues avec la DNS sont retrouvées avec le modèle *ELSA*. Il s'agit de résultats intéressants dans le sens où l'équation de transport d'interface liquide/gaz est une équation postulée, écrite à l'aide d'une approche phénoménologique.

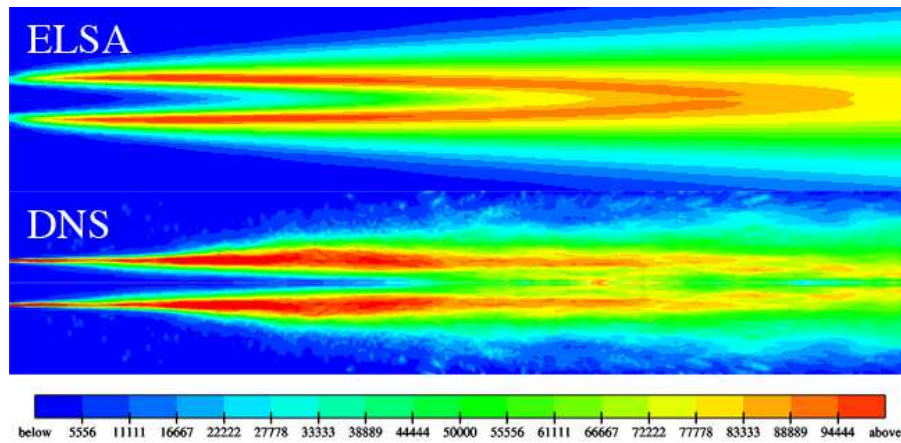


FIG. 6.5 – Champs de densité d'interface liquide/gaz par unité de volume $\bar{\Sigma}$ donnés par le modèle *ELSA* et par la DNS

En ce qui concerne le profil axial, le modèle tend à surestimer la densité d'interface liquide/gaz dans la zone très proche de l'injecteur. C'est une conséquence directe du comportement observé au paragraphe précédent sur la fraction volumique légèrement sous-estimée dans cette région du spray. En effet, si l'on avait exactement 100% de liquide, la quantité d'interface liquide/gaz serait alors strictement nulle. L'équation de transport postulée dans cette étude s'appuie sur un terme d'initialisation ϕ_{init} présenté au paragraphe 4.2 (relation 4.45) qui crée de l'interface liquide/gaz de façon proportionnelle aux gradients de fraction de liquide, dès qu'il existe un mélange liquide/gaz. Néanmoins, la tendance générale à créer de l'interface liquide/gaz pour atteindre une valeur maximale de $90000m^{-1}$ à une distance de dix-huit diamètres de l'injecteur est reproduite par le modèle et ce, pour les deux maillages testés.

Il est à remarquer que les valeurs radiales de la densité d'interface liquide/gaz sont assez proches entre la modélisation et la simulation numérique directe. De légères différences entre les deux maillages utilisés avec le modèle sont cependant remarquables, en particulier pour le profil à une distance de cinq

diamètres de l'injecteur. En l'occurrence, la valeur maximale est mieux prédite avec le maillage le plus fin. Cette différence s'estompe ensuite pour les profils à dix et vingt diamètres de l'injecteur. Notons que le maximum de quantité de surface est dépendant des constantes du modèle. On peut s'attendre avec une DNS au maillage encore plus fin, à capter du plissement d'interface et des particules liquides plus fines. Cela devrait conduire à une augmentation de la quantité d'interface, ce qui demanderait un réajustement des constantes α_i .

L'énergie cinétique turbulente moyenne de mélange La figure 6.6 présente les champs d'énergie cinétique turbulente moyenne du mélange liquide/gaz $\tilde{k}$ calculés avec la DNS et le modèle *ELSA*. Les énergies cinétiques turbulentes sont du même ordre de grandeur et ont des comportements relativement proches. Lorsque l'on se réfère au profil axial présenté à la planche P.6.1.4., on observe une décroissance du niveau de turbulence en zone dense du spray avec ensuite une augmentation de l'énergie cinétique turbulente. Cette tendance est captée par la modèle. Il existe cependant une différence significative en zone proche de l'injecteur. Plusieurs explications sont possibles. Les auteurs de la DNS s'interrogent sur une éventuelle dissipation numérique importante de l'énergie dans cette zone de l'écoulement. Il est cependant probable que cette différence entre la DNS et la modélisation soit essentiellement due à un problème de modélisation de l'énergie cinétique turbulente du mélange liquide/gaz.

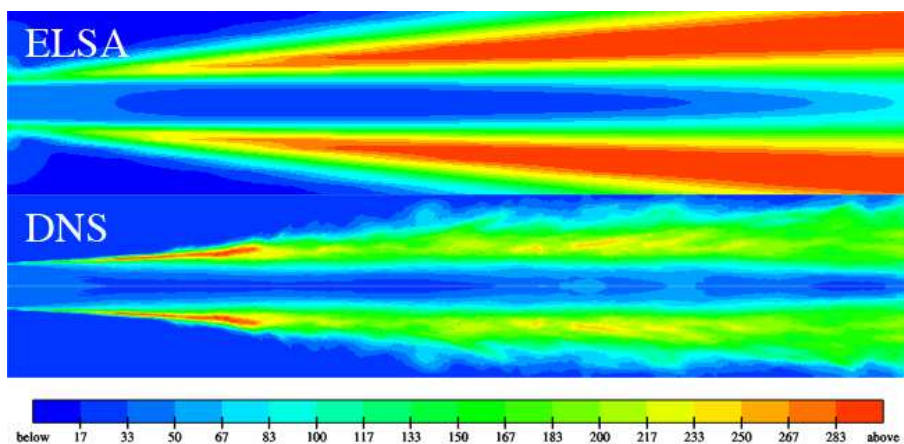


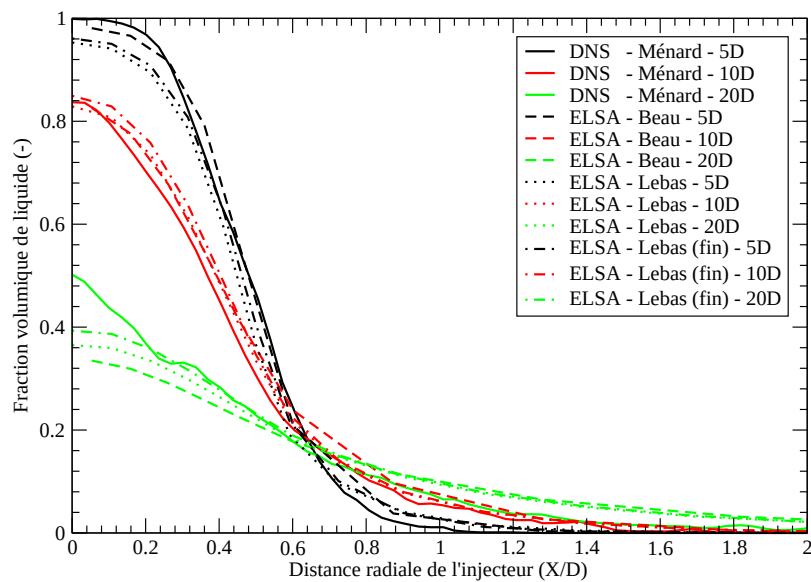
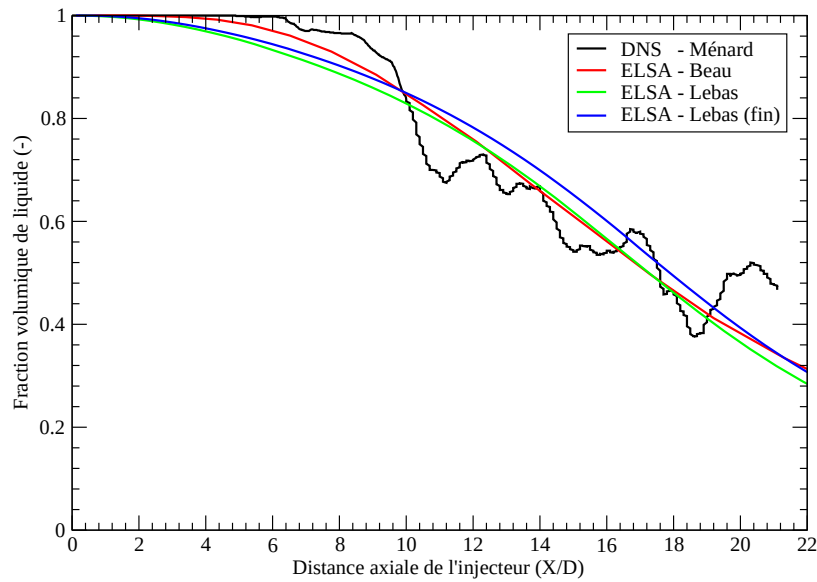
FIG. 6.6 – Champs d'énergie cinétique turbulente moyenne de mélange $\tilde{k}$ donnés par le modèle *ELSA* et par la DNS

Les profils radiaux permettent le même type de conclusions. Les ordres de grandeurs obtenus avec le modèle *ELSA* sont assez proches de ceux obtenus avec la DNS. Cependant, le modèle a tendance à surestimer radialement l'énergie cinétique turbulente lorsque l'on s'éloigne de l'injecteur.

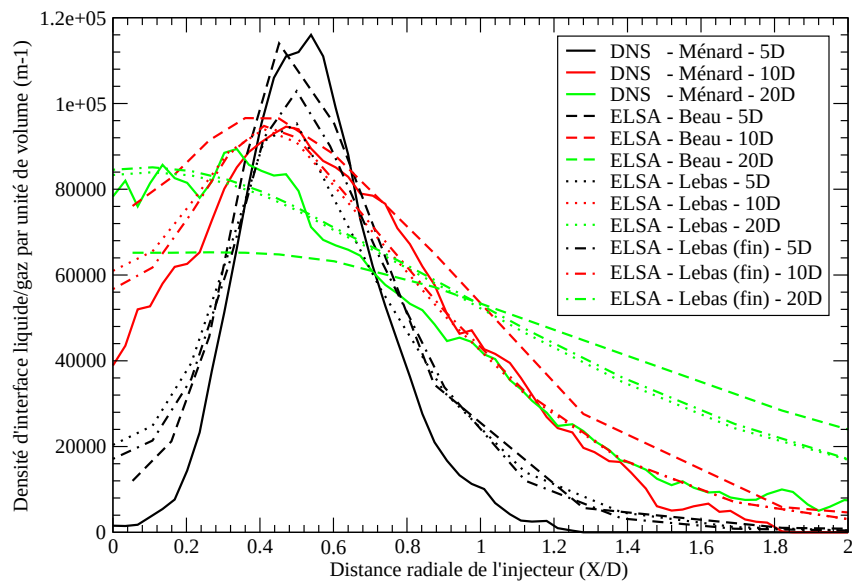
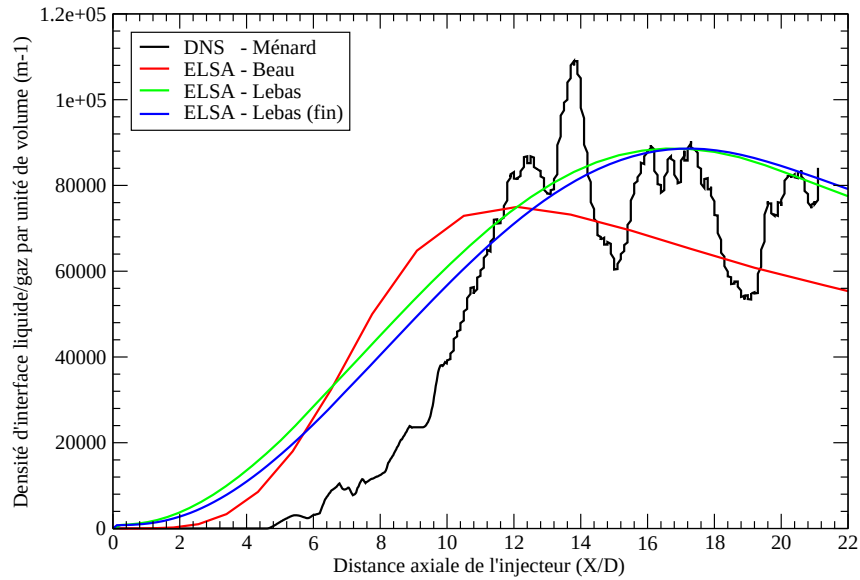
Il serait très intéressant de faire évoluer le modèle (k, ε) standard utilisé durant cette étude vers une version diphasique. En effet, cette différence entre la modélisation et le calcul obtenu avec la DNS pourrait être due au fait que l'énergie cinétique turbulente du mélange liquide/gaz n'est pas composée uniquement des énergies cinétiques turbulentes du liquide et du gaz mais aussi d'une énergie cinétique de glissement entre ces phases (voir le paragraphe 3.1.5).

6.1.4 Bilan de l'étude comparative DNS - *ELSA*

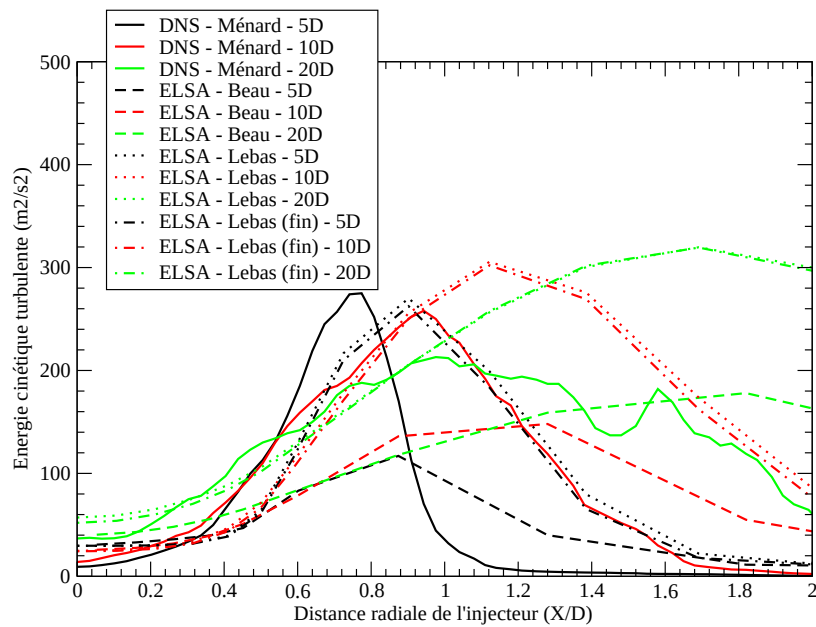
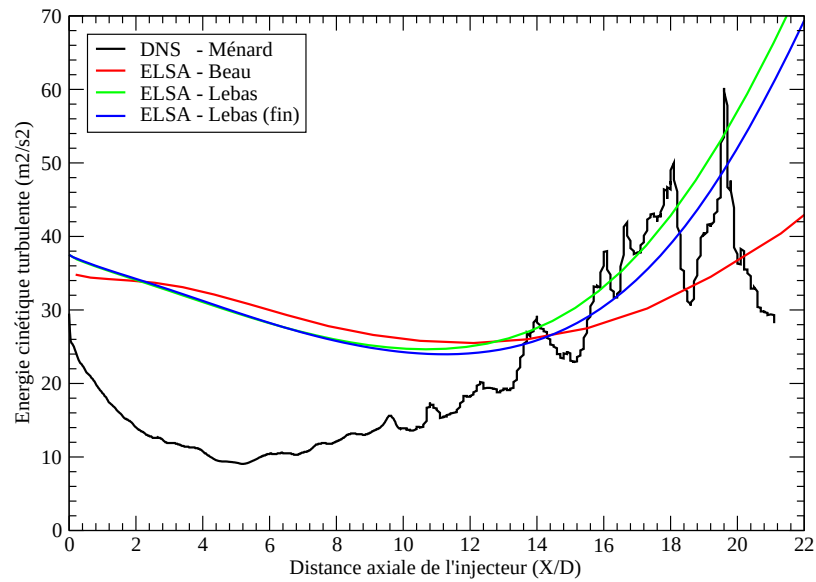
Cette première partie de l'étude a permis de valider le modèle *ELSA* en zone proche de l'injecteur à l'aide d'un calcul DNS réalisé par Ménard *et al.* [21]. L'étude comparative présente des résultats intéressants en ce qui concerne le comportement du modèle. Considérant l'équation de transport de la densité d'interface liquide/gaz comme étant postulée à l'aide d'une approche phénoménologique, l'étude comparative sur cette grandeur est particulièrement encourageante. De plus, le modèle a été utilisé tel qu'il a été présenté aux chapitres 3, 4 et 5, sans la modification d'aucun paramètre numérique. Afin de tester l'aspect prédictif du modèle, c'est cette même version du modèle qui sera utilisée pour le reste de l'étude.



P.6.1.2. - Comparaisons DNS - *ELSA* en terme de fraction volumique de liquide : en haut un profil dans l'axe d'injection, en bas un profil radial à différentes distances de l'injecteur



P.6.1.3. - Comparaisons DNS - *ELSA* en terme de densité d'interface liquide/gaz par unité de volume : en haut un profil dans l'axe d'injection, en bas un profil radial à différentes distances de l'injecteur



P.6.1.4. - Comparaisons DNS - *ELSA* en terme de d'énergie cinétique turbulence : en haut un profil dans l'axe d'injection, en bas un profil radial à différentes distances de l'injecteur

6.2 Calculs de sprays Diesel sans vaporisation

Cette partie de l'étude consiste à présenter différents cas de calcul dans le but de tester l'influence de certains paramètres numériques et physiques sur l'évolution du spray dans la chambre de combustion. L'ensemble de ces calculs sont faits *a priori*, en utilisant le modèle *ELSA* tel qu'il a été validé avec le calcul DNS en zone dense du spray. Les conditions de calcul sont détaillées au paragraphe suivant et les résultats des modélisations sont présentés par la suite.

6.2.1 Conditions de calcul

L'ensemble des calculs présentés dans ce paragraphe 6.2 sont effectués dans les mêmes conditions. Le profil temporel de vitesse imposé en sortie d'injecteur est donné en figure 6.7 et correspond à un système d'injection utilisé dans les moteurs Diesel actuels. Il est supposé que la vitesse est uniforme sur l'ensemble de la section de sortie de l'injecteur, considérant une injection non cavitante. De plus, le liquide étant injecté à une température identique à celle du gaz $T_l = T_g = 293.15K$, les échanges thermique et massique entre les phases ne sont pas pris en compte dans la modélisation.

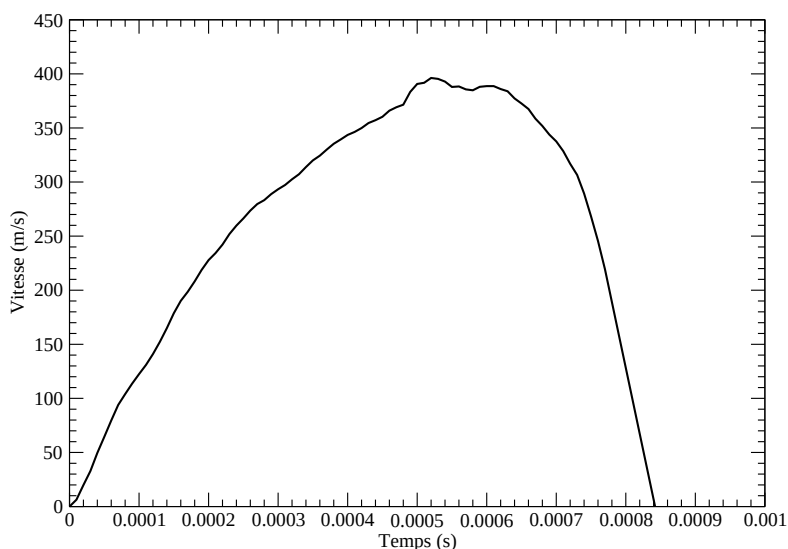


FIG. 6.7 – Profil temporel de vitesse à la sortie de l'injecteur

Les conditions thermodynamiques dans la chambre de combustion sont données en figure 6.8. Un exemple de maillage type utilisé dans de telles conditions a déjà été présenté en figure 6.2. Au niveau du raffinement du maillage en zone dense, un nombre de dix mailles le long du diamètre de l'injecteur est choisi, conformément à ce qui a déjà été proposé pour le calcul comparatif avec la DNS. En effet, un niveau de raffinement plus élevé a été testé lors de cette étude et les différences observées ne sont

pas suffisamment importantes pour justifier l'utilisation de plus de mailles le long du diamètre de l'injecteur. Ceci est d'autant plus justifié en vue d'une utilisation dans un contexte industriel. Ainsi, avec dix mailles, la convergence en espace semble être suffisante.

Plusieurs essais sont effectués par la suite pour caractériser l'influence de ces paramètres numériques ou physiques sur le développement du spray dans son ensemble :

- l'activation ou non du couplage Euler - Lagrange en zone diluée ;
- trois niveaux de turbulence en sortie d'injecteur ;
- deux raffinements de maillage différents suivant l'axe d'injection ;
- l'activation ou non du sous-modèle de rupture secondaire.

Lors des différentes comparaisons présentées par la suite, la version de référence du modèle *ELSA* est toujours la même : une formulation eulérienne en zone dense et en zone diluée, une intensité turbulente en sortie d'injecteur de 5%, un maillage constitué de 66240 mailles et le sous-modèle de rupture secondaire des gouttes activé.

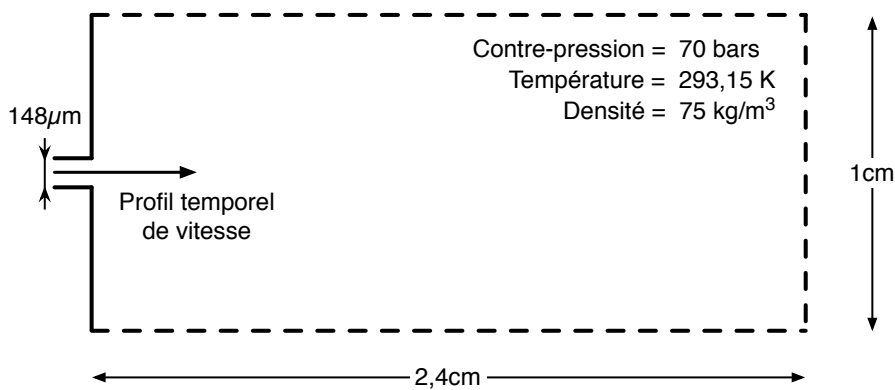


FIG. 6.8 – Conditions des calculs *a priori* de sprays Diesel sans vaporisation

En premier lieu, l'influence du couplage Euler - Lagrange est testée sur des conditions de type Diesel.

6.2.2 Influence du couplage Euler - Lagrange

La méthode de couplage a déjà été présentée au chapitre 5 et consiste à fermer de façon plus précise les termes de flux turbulents des équations de transport de la fraction massique moyenne de liquide $\tilde{Y}_l$ et de la densité massique moyenne d'interface liquide/gaz $\tilde{\Omega}$. Les intérêts d'une telle méthode de couplage ont également été présentés au paragraphe 5.3.

Il s'agit donc ici de tester l'influence de cette méthode de couplage sur le développement d'un spray Diesel dans une chambre de combustion. Pour cela, un calcul est effectué avec la version de référence du modèle *ELSA*. En comparaison, trois calculs hybrides Euler - Lagrange sont présentés. Seul le critère de transition Euler/Lagrange est changé entre ces trois calculs. Pour le premier, le critère de transition est choisi tel que la fraction volumique de liquide soit de 10%, pour le second c'est 5% de

fraction volumique de liquide qui est choisi et pour le troisième 1%. Au dessus de 10%, le formalisme lagrangien serait utilisé dans des conditions inadéquates (spray non dilué).

Afin de mettre en évidence les différences obtenues entre l'approche eulérienne et l'approche hybride Euler - Lagrange, deux champs de valeurs sont présentés : un champ de fraction massique de liquide (planche P.6.2.5.) et un champ de diamètre moyen de Sauter (planche P.6.2.7.). Ces deux planches présentent le calcul obtenu avec le formalisme eulérien et celui avec l'approche hybride pour un critère de transition pris à 5% de fraction volumique de liquide. Pour mieux se représenter la forme du spray, seules les valeurs significatives de fraction massique de liquide sont représentées et un masque en est issu et appliqué sur les champs de diamètre moyen de Sauter (lignes blanches). De ces champs de valeurs, des profils axiaux et radiaux sont extraits (planche P.6.2.6. pour la fraction massique de liquide et planche P.6.2.8. pour le diamètre moyen de Sauter).

En ce qui concerne les champs et profils de fraction massique moyenne de liquide, les différences entre l'approche entièrement eulérienne et l'approche hybride ne sont pas significatives. En effet, en se référant aux profils, les seules différences notables se situent en zone diluée du jet, lorsque la fraction massique de liquide descend en dessous de 15%.

Ces résultats sont en adéquation avec ceux obtenus par Beau [84]. A l'aide du modèle quasi-multiphasique développé durant sa thèse (présenté au paragraphe 5.2.2), le phénomène de traînée des gouttes est introduit dans la fermeture du terme de flux turbulent de liquide. Les résultats obtenus sont également peu différents en comparaison de ceux obtenus avec une loi gradient. L'approche hybride Euler - Lagrange est une autre méthode pour fermer de façon plus précise ces termes de flux turbulents, en y intégrant l'impact d'une distribution de taille de gouttes sur la vitesse du liquide. Le fait qu'il y ait peu de différences entre une fermeture de type loi gradient et des fermetures plus complexes intégrant la notion de traînée signifie que dans le cas d'un jet liquide haute vitesse de type Diesel, le flux axial de masse est dominé par la convection moyenne et que le flux radial de masse peut être assimilé à de la diffusion turbulente.

Cependant, des différences existent en ce qui concerne le diamètre moyen de Sauter. Globalement, une diminution du diamètre est observée lorsque l'approche hybride est utilisée.

Une explication possible serait de considérer l'activation de l'hybridation Euler - Lagrange comme une méthode permettant une meilleure estimation des flux turbulents $\widetilde{u_i'' y_i''}$ et $\widetilde{u_i'' \omega''}$. Ces flux représentent le différentiel de vitesse qu'il existe entre la vitesse du liquide et la vitesse du gaz. Une meilleure estimation de ces flux permet de déterminer de façon plus précise ce différentiel. Ainsi la vitesse relative u_{rel} est calculée en prenant en compte une distribution de taille de gouttes plutôt qu'un diamètre moyen de Sauter. Cette différence impacte le régime de rupture secondaire : la vitesse relative liquide/gaz intervient dans le terme source ϕ_{2ndBU} (défini à la relation 4.54), caractérisant le phénomène de rupture secondaire des gouttes.

Il est nécessaire de faire remarquer que cette méthode hybride Euler - Lagrange possède un avantage certain : celui de proposer un champ de fraction massique de liquide tenant compte d'une distribution de taille de gouttes plutôt qu'un diamètre moyen de Sauter dans chaque cellule. Une alternative à cette méthode serait d'utiliser un formalisme lagrangien en zone diluée, comme il est proposé dans

les travaux de Blokkeel [81, 82] et Beau [83, 84, 85]. Cependant, avec le raffinement de maillage nécessaire au modèle *ELSA* pour prendre en compte la zone dense du jet, il est très délicat d'obtenir une convergence statistique suffisante en lagrangien, comme le montre la figure 6.9 qui compare les champs de fraction massique de liquide obtenus avec la méthode hybride et l'approche lagrangienne seule en zone diluée.

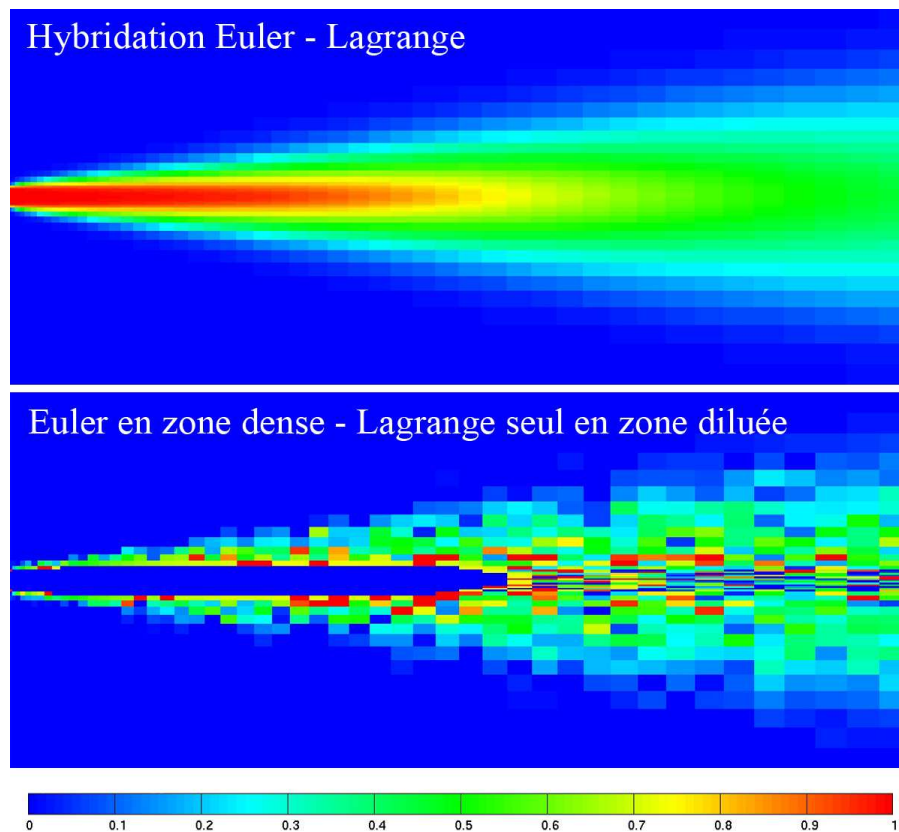


FIG. 6.9 – Champs de fraction massique de liquide - en haut avec la méthode hybride Euler - Lagrange, en bas avec un formalisme lagrangien seul en zone diluée. *NB : Les champs présentés ici concernent des calculs effectués dans une configuration autre que celle présentée dans ce paragraphe.*

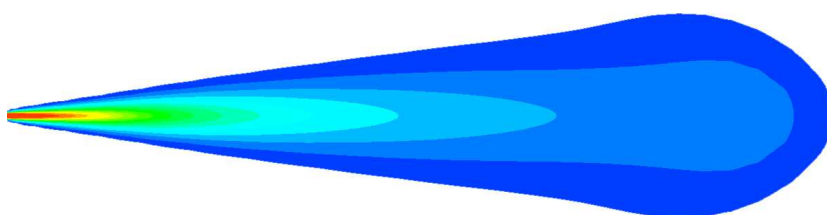
Il serait possible d'augmenter le nombre de particules créées à chaque pas de temps, dans chaque cellule, afin de converger statistiquement et d'obtenir un champ de fraction massique de liquide moins bruité mais des aspects numériques tels que l'allocation mémoire et le temps de calcul deviendraient limitant en vue d'une utilisation du modèle dans un contexte industriel.

Les différences observées au niveau du diamètre moyen de Sauter sont faibles (de l'ordre du micromètre) mais compte-tenu de la gamme de diamètre des gouttes que composent le spray, ces différences sont de l'ordre de 15%. Il est donc difficile de conclure quant à l'apport de cette méthode de couplage Euler - Lagrange dans de telles conditions d'injection. En effet, les mesures de taille de gouttes dans des conditions d'injection Diesel ne permettent pas une précision de cet ordre, même très loin de l'injecteur mais ce potentiel de variation que possède le modèle *ELSA* en utilisation hybride Euler -

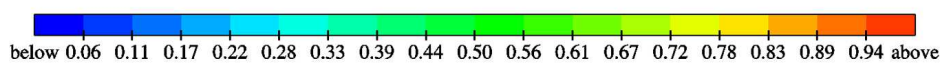
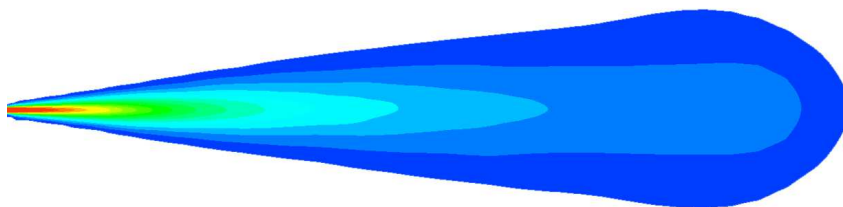
Lagrange est intéressant et nécessiterait d'être étudié dans des configurations où la vitesse d'injection est plus faible.

Il a été décidé de ne pas activer le couplage Euler - Lagrange pour la suite de l'étude. Ces conclusions concernent uniquement l'injection à très grande vitesse, étudiée durant cette thèse. Elles pourraient être différentes si certaines configurations étaient considérées, comme l'impact d'un spray contre une paroi de piston ou les interactions fortes entre jets (phénomènes spécifiques de collisions/coalescences).

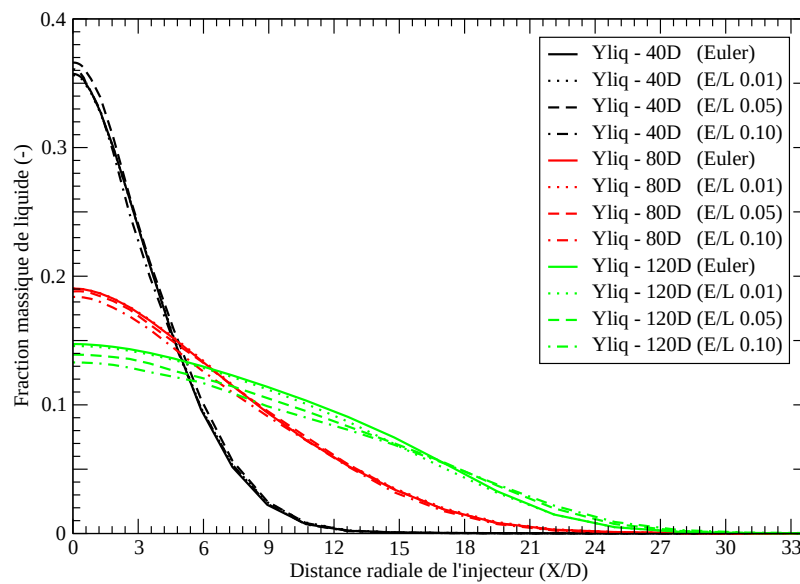
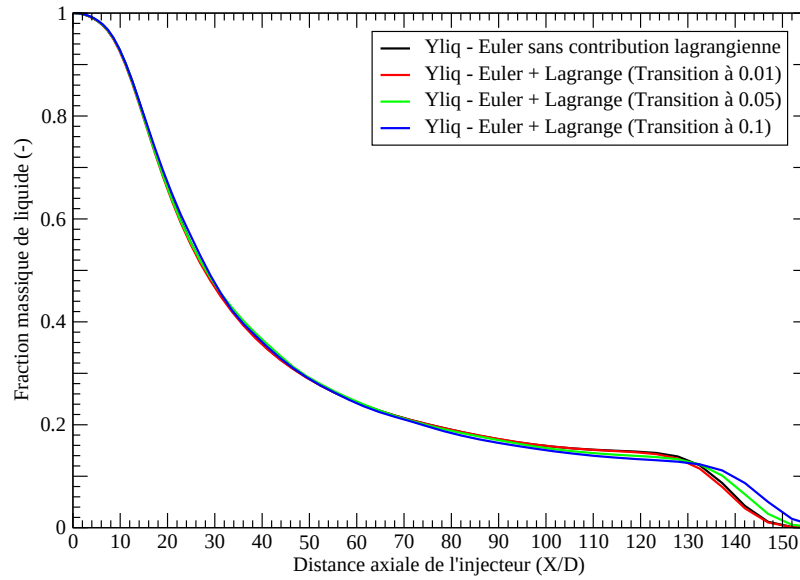
Sans couplage Lagrange



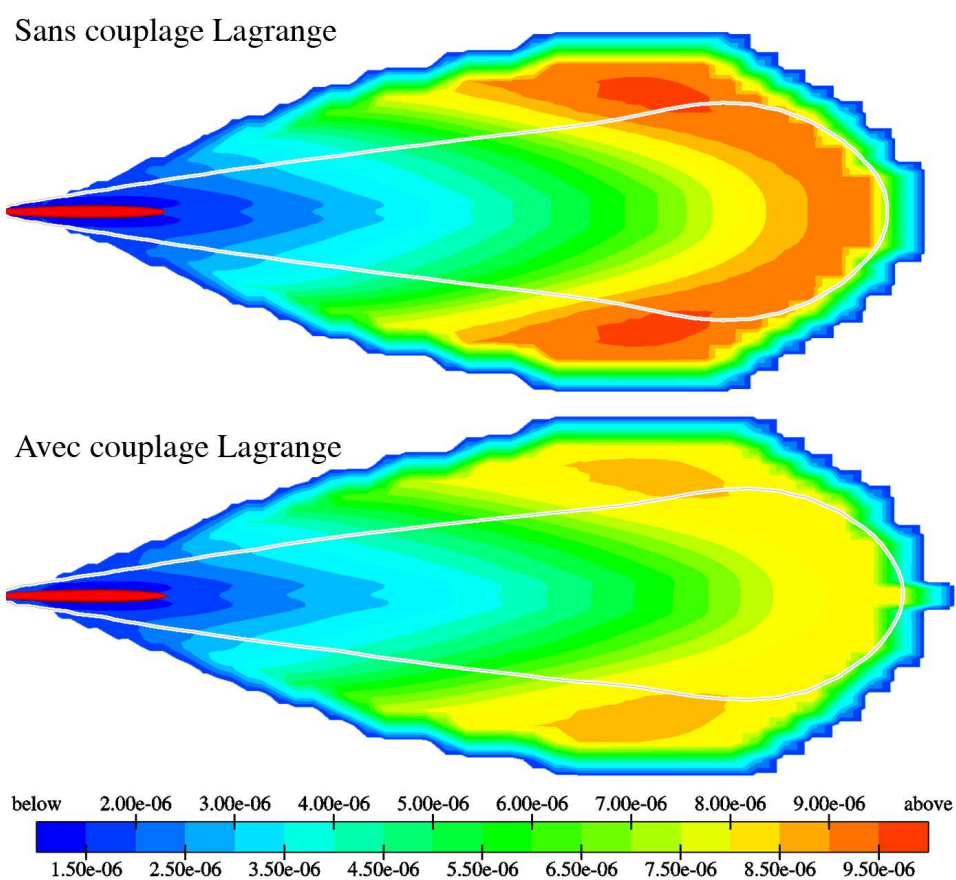
Avec couplage Lagrange



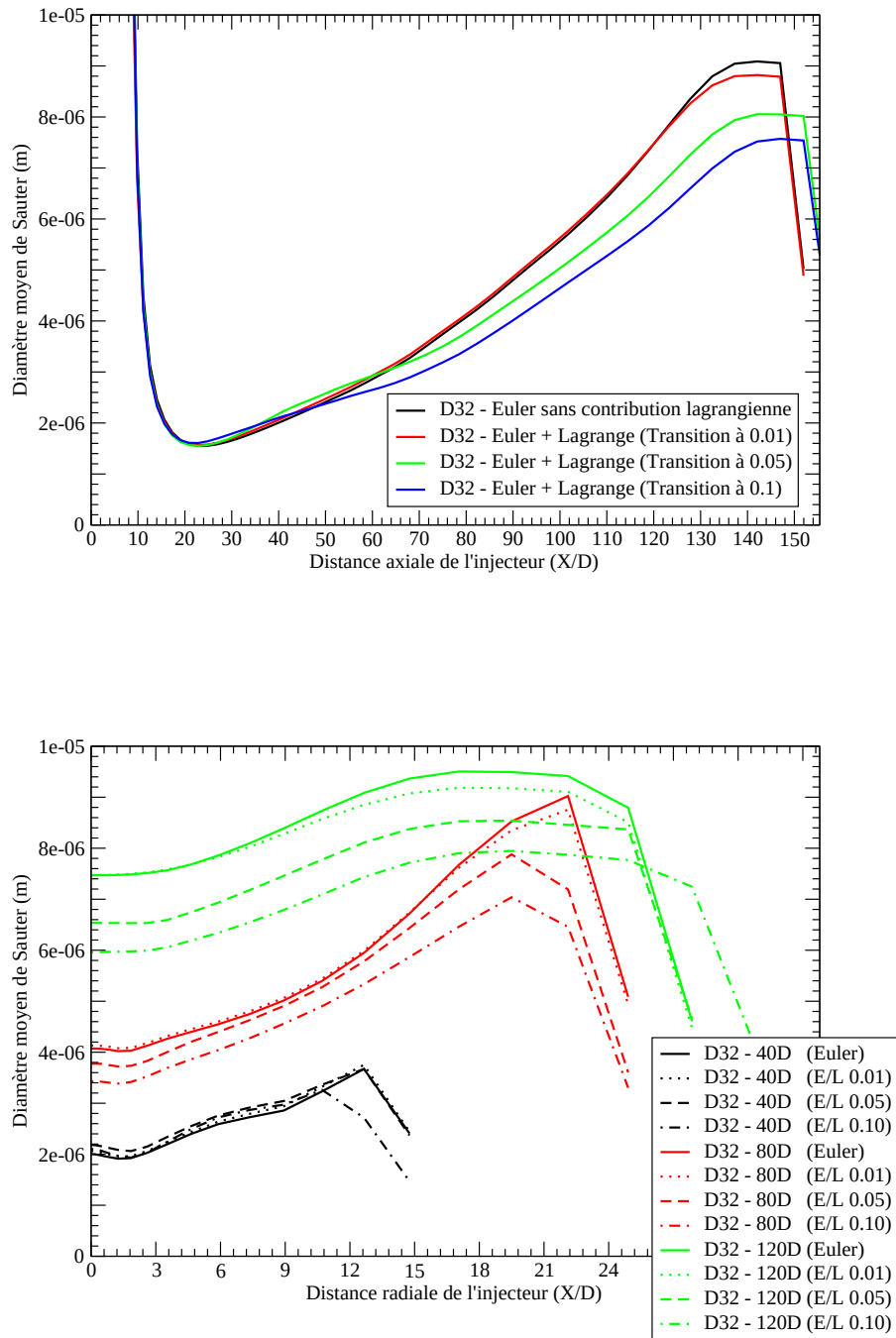
P.6.2.5. - Influence du couplage lagrangien sur le champ de fraction massique de liquide pour un critère de transition Euler/Lagrange de 5% de fraction volumique de liquide - $t = 0.7ms$



P.6.2.6. - Influence du couplage lagrangien sur les profils axiaux (en haut) et radiaux (en bas) de la fraction massique moyenne de liquide, pour différentes valeurs de fraction volumique pour la transition Euler/Lagrange - $t = 0.7ms$



P.6.2.7. - Influence du couplage lagrangien sur le champ de diamètre moyen de Sauter pour un critère de transition Euler/Lagrange de 5% de fraction volumique de liquide - $t = 0.7ms$



P.6.2.8. - Influence du couplage lagrangien sur les profils axiaux (en haut) et radiaux (en bas) du diamètre moyen de Sauter D_{32} , pour différentes valeurs de fraction volumique pour la transition Euler/Lagrange - $t = 0.7ms$

6.2.3 Influence du niveau de turbulence à la sortie de l'injecteur

Le niveau de turbulence $I_t = u''/\tilde{u}$ est une donnée peu connue en sortie d'injecteur. Malgré le fait qu'un spray génère sa propre turbulence lorsqu'il se développe dans la chambre de combustion, le niveau de turbulence en condition limite du calcul joue un rôle non négligeable sur l'écoulement.

Pour un écoulement de type canal, une intensité turbulente de l'ordre de 5% est une valeur communément admise et utilisée. Pour tester l'influence de ce paramètre physique sur le développement du jet liquide, deux autres valeurs sont essayées : 1% et 10%. Afin de mettre en évidence les différences entre les trois cas de calcul présentés ici, deux champs de valeurs sont proposés : un pour la fraction massique de liquide (planche P.6.2.9.) et un pour le diamètre moyen de Sauter (planche P.6.2.11.). Des profils en sont extraits, présentés aux planches P.6.2.10. et P.6.2.12..

Le fait de changer le niveau de turbulence I_t en condition limite influence le développement du jet de manière significative. Augmenter le niveau de turbulence en sortie d'injecteur a pour conséquences de diminuer la pénétration liquide et d'augmenter légèrement l'angle du spray. Si l'on se réfère au profil axial de la fraction massique de liquide, il apparaît clairement qu'augmenter le niveau turbulence déstabilise également le jet plus rapidement (la fraction massique de liquide chute plus près de l'injecteur). Cela concorde avec l'ensemble des travaux menés sur l'influence de la turbulence du liquide sur le développement d'un jet dans une chambre de combustion (par exemple Stahl *et al.* [12, 13]).

L'impact sur la taille des gouttes est également visible. En zone proche de l'injecteur, plus le niveau de turbulence augmente, plus le diamètre moyen de Sauter chute rapidement pour ensuite atteindre une valeur seuil commune aux trois calculs. Cet effet est principalement dû au terme source ϕ_{turb} , qui est piloté par un temps caractéristique de turbulence. Ce temps caractéristique est un temps de rappel vers un régime critique symbolisé par $\tilde{\Omega}_{crit,1}$. Plus en aval de l'écoulement, les différences sont moins significatives et sont provoquées par des différences déjà observées au niveau de la fraction massique de liquide.

En se référant aux champs de diamètre moyen de Sauter, les différences en tête de spray sont plus importantes entre le cas à 1% et celui à 5% plutôt qu'entre le cas à 5% et celui à 10%. Ceci est principalement dû au fait qu'à partir d'un certain niveau de turbulence, le régime de collisions/coalescences devient prépondérant devant tous les autres phénomènes physiques agissant sur le spray.

Une étude parallèle a permis d'étudier les profils spatiaux et temporels de vitesse et d'intensité turbulente en sortie d'injecteur *via* des simulations 3D *RANS* de l'écoulement dans un injecteur, pour deux pressions d'injection différentes. La figure 6.10 présente, dans le cas de la pression d'injection la plus basse, des champs de valeurs en sortie d'injecteur pour la vitesse ainsi que l'intensité turbulente à un instant donné de l'injection. Des valeurs moyennes sont extraites de ces champs, pour chaque pas de temps de calcul, ainsi que les vitesses minimale et maximale, afin d'illustrer l'aspect très fluctuant de l'écoulement. Les profils temporels de ces grandeurs sont également présentés en figure 6.10.

Ici n'est présenté que le cas à $P_{inj} = 80MPa$ mais le constat est le même pour une pression d'injection plus importante (135MPa) : le niveau moyen d'intensité turbulente ne descend pas en dessous de 8%. Les résultats de ces calculs laissent donc supposer qu'une intensité turbulente de

cet ordre de grandeur pourrait être envisagée comme condition limite en sortie d'injecteur. Il serait intéressant d'utiliser ce type de profils en conditions initiales. Cependant, un aspect limitant de ces calculs est celui de l'utilisation du modèle de turbulence (k,ε) en proche paroi, en dehors de son domaine de validité. D'autre part, ces calculs ne sont pas toujours disponibles en raison de difficultés liées à l'utilisation de maillages mobiles en zone transitoire de levée et de descente d'aiguille. L'idéal serait un calcul dans l'injecteur couplé à l'utilisation du modèle *ELSA* car il permet la prise en compte de ce type de conditions initiales.

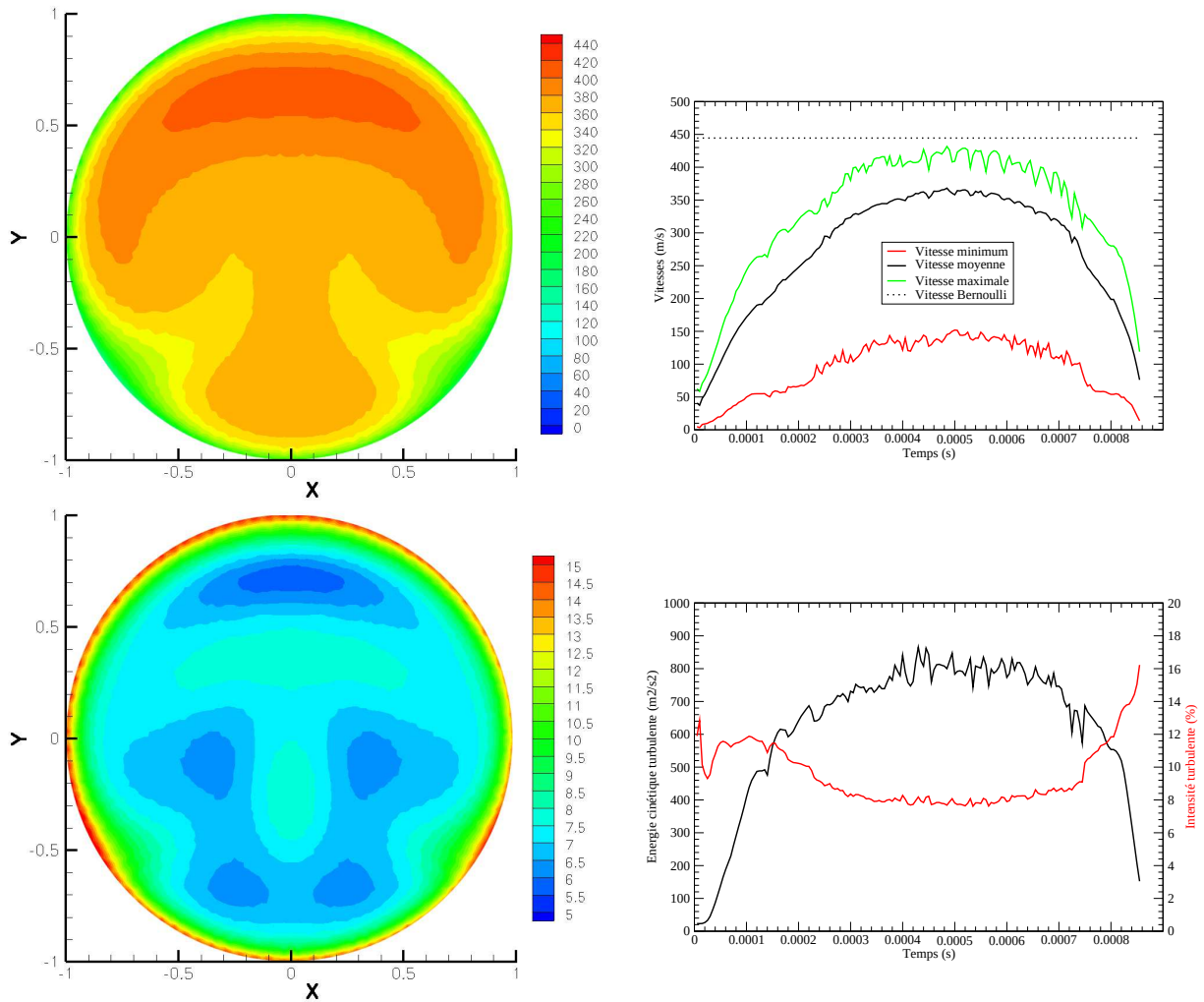
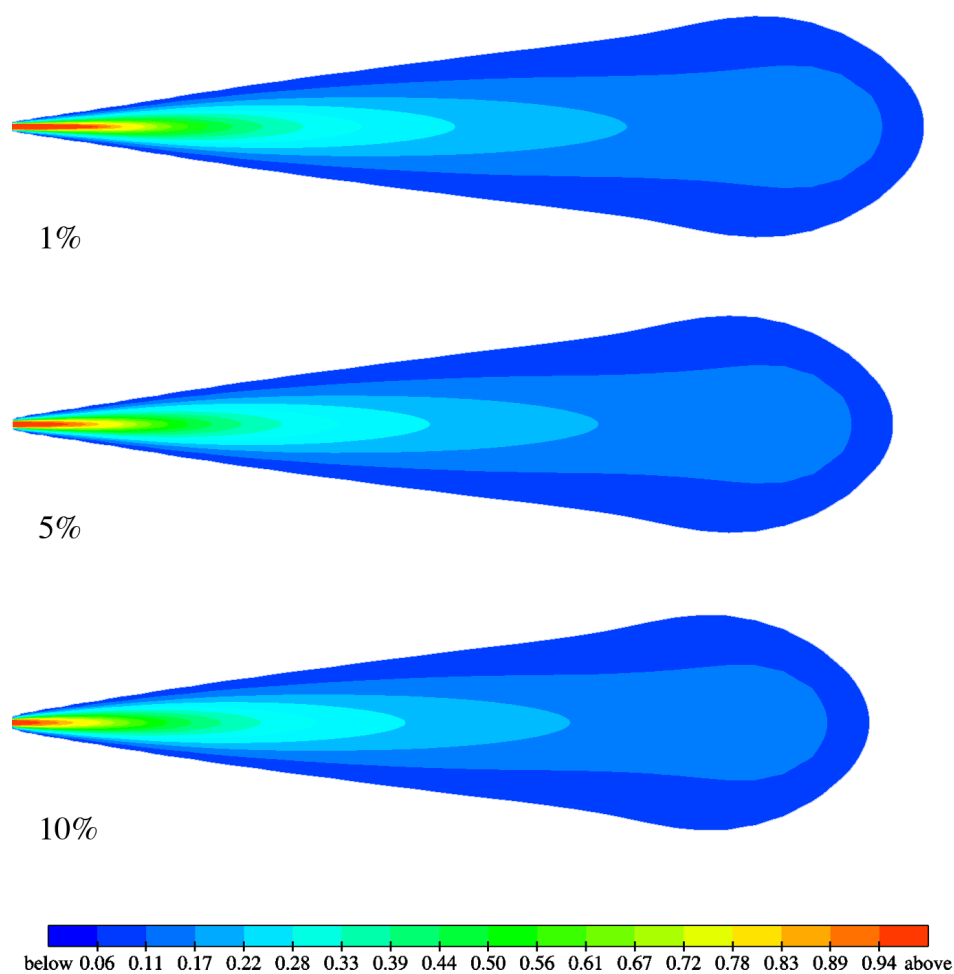


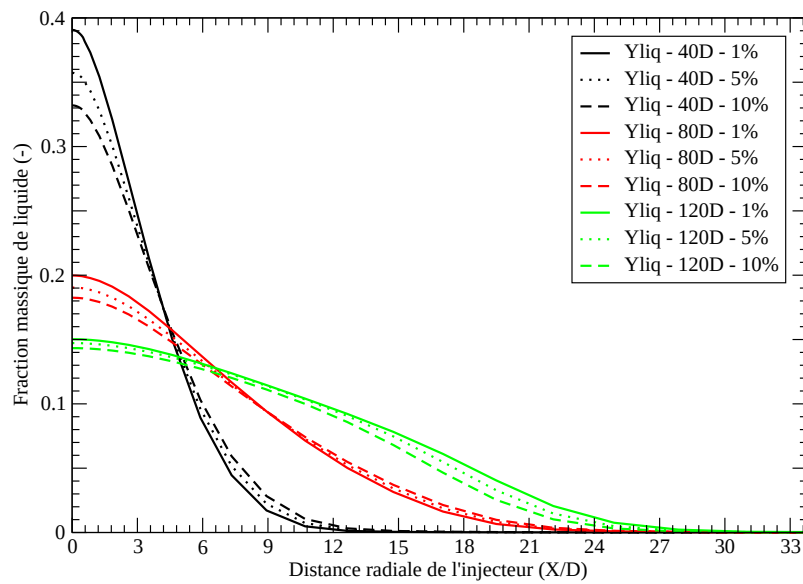
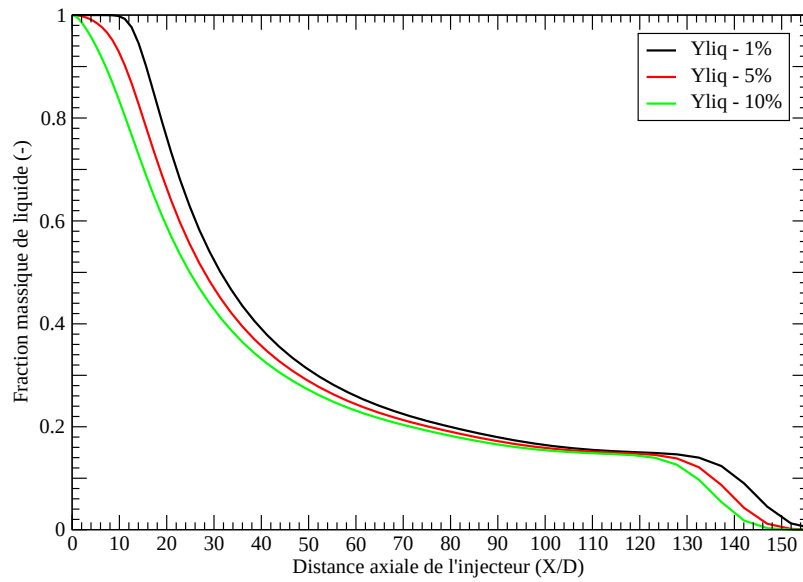
FIG. 6.10 – Vitesse et intensité turbulente (%) en sortie d'injecteur pour une pression d'injection de $P_{inj} = 80 \text{ MPa}$ à $t = 0.5 \cdot 10^{-3} \text{ s}$

Des calculs avec le modèle *ELSA* ont été effectués en prenant en compte ces conditions initiales présentées en figure 6.10 qui sont fluctuantes en espace et en temps. Un algorithme de couplage a été développé afin d'adapter ces données à un maillage type utilisé par le modèle *ELSA*. Pour ces calculs, un nombre de vingt mailles le long du diamètre de l'injecteur a été choisi afin de perdre le moins d'information possible lors du couplage avec le calcul dans l'injecteur. Cependant, la base

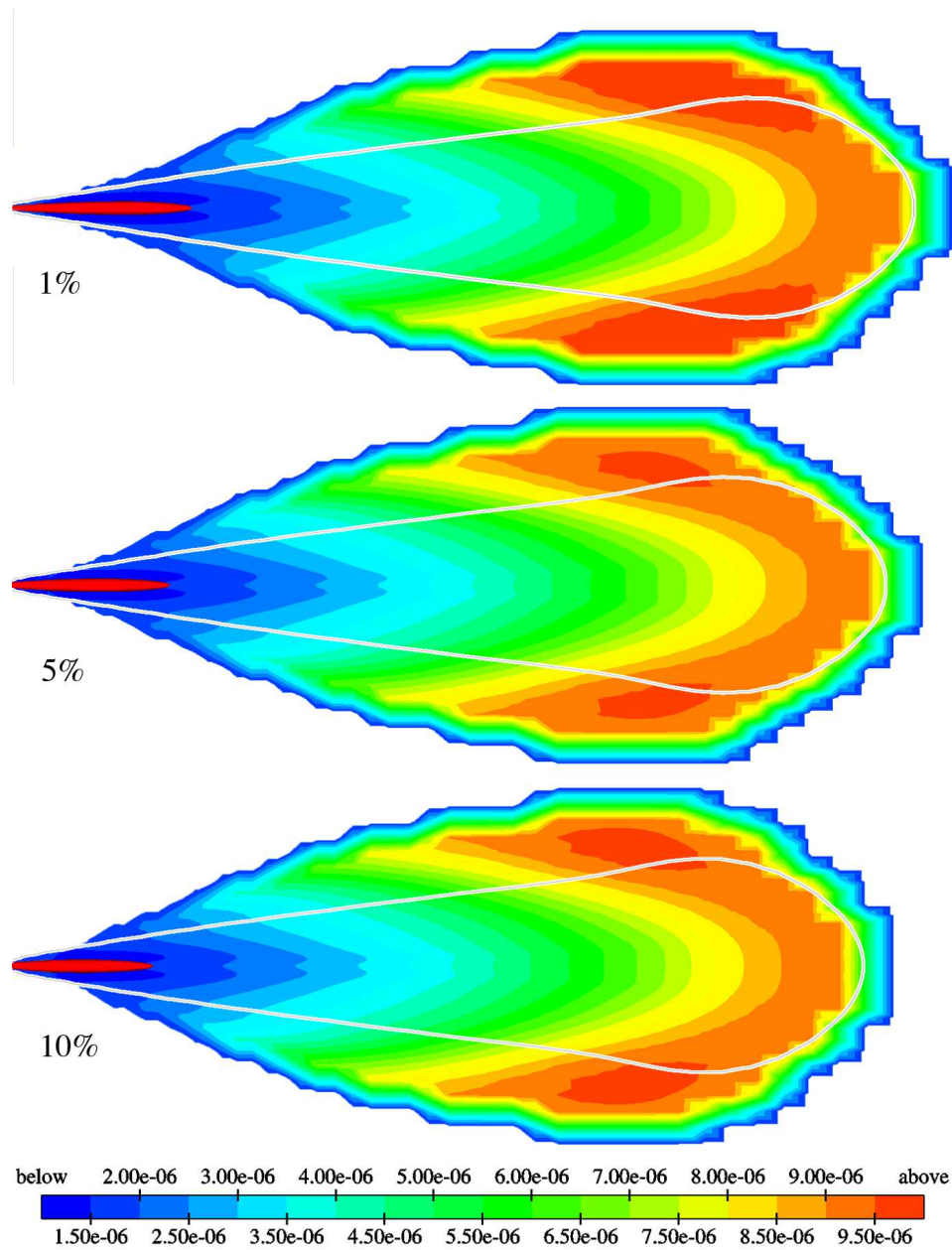
expérimentale utilisée pour valider les calculs s'est avérée être incertaine. Pour cette raison, les résultats ne sont pas présentés dans ce manuscrit. Pour la suite de l'étude, en l'absence de calculs dans l'injecteur, une intensité turbulente en sortie d'injecteur de 5% est donc retenue. Cette valeur semble être un bon compromis à la vue des différents résultats présentés dans ce paragraphe.



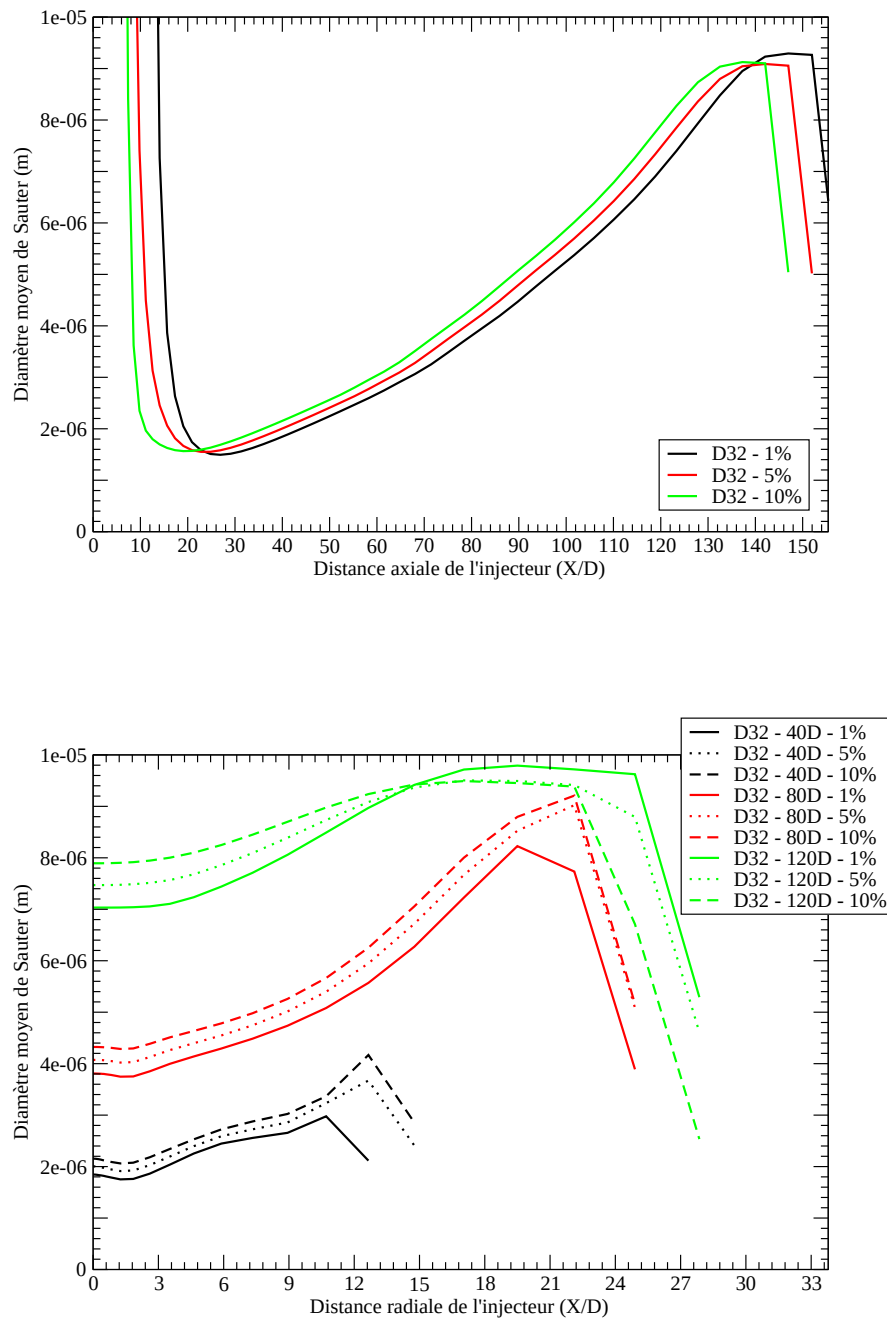
P.6.2.9. - Influence de l'intensité turbulente en sortie d'injecteur sur la dispersion du liquide, représentée par la fraction massique moyenne de liquide $\tilde{Y}_l$ - de haut en bas, $I_t = 0.01$, $I_t = 0.05$ et $I_t = 0.10$ - $t = 0.7 \text{ ms}$



P.6.2.10. - Influence de l'intensité turbulente sur les profils axiaux (en haut) et radiaux (en bas) de la fraction massique de liquide - $t = 0.7ms$



P.6.2.11. - Influence de l'intensité turbulente en sortie d'injecteur sur la taille des gouttes du spray, représentée par le diamètre moyen de Sauter D_{32} - de haut en bas, $I_t = 0.01$, $I_t = 0.05$ et $I_t = 0.10$ - $t = 0.7ms$



P.6.2.12. - Influence de l'intensité turbulente sur les profils axiaux (en haut) et radiaux (en bas) du diamètre moyen de Sauter $D_{32} - t = 0.7ms$

6.2.4 Influence du niveau de raffinement du maillage

Cette partie de l'étude concerne l'influence du niveau de raffinement du maillage utilisé sur le développement du spray dans la chambre. Deux maillages sont testés, avec la version de référence du modèle *ELSA* (formulation eulérienne, intensité turbulente en sortie d'injecteur de 5% et sous-modèle de rupture secondaire activé). Un exemple de maillage utilisé est présenté en figure 6.11.

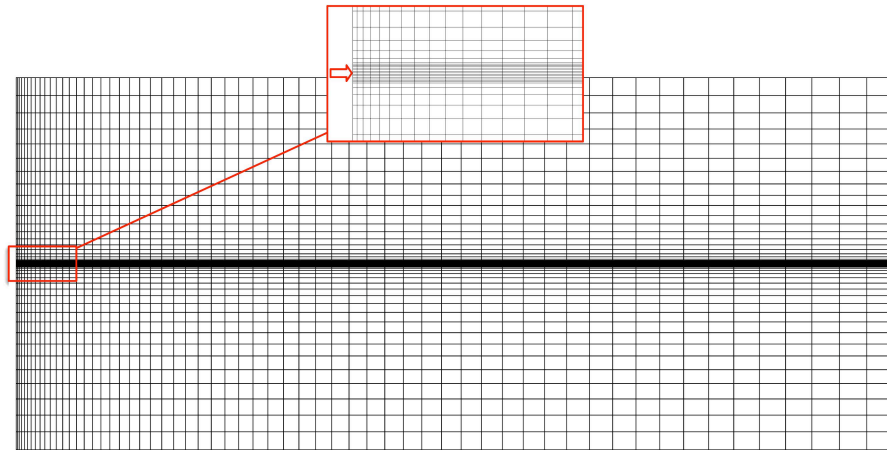
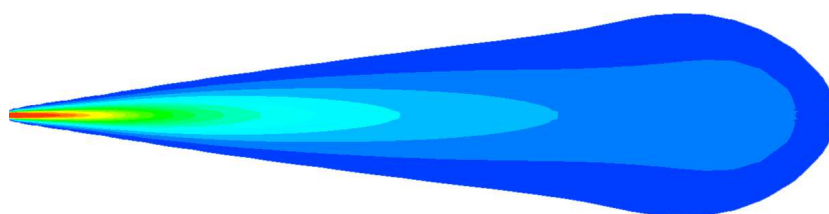


FIG. 6.11 – Maillage type utilisé pour la majorité des calculs avec le modèle ELSA

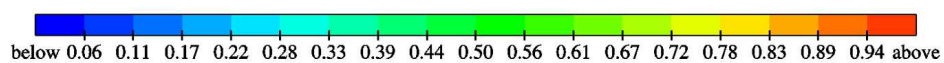
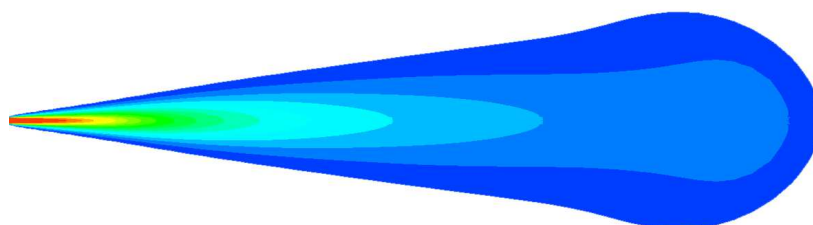
Les deux maillages testés dans cette partie comprennent dix mailles le long du diamètre de l'injecteur. Un raffinement progressif vers la zone du dense du jet est utilisé, dans les directions axiale et radiale (pour une meilleure visualisation, se référer à la figure 6.11). Le maillage de référence ("maillage grossier") est constitué de 66240 cellules. Le second maillage ("maillage fin") est constitué du double de cellules, à savoir 142560. Pour mettre en évidence les différences entre ces deux maillages sur les résultats des calculs, des champs de valeurs sont présentés pour la fraction massique de liquide (planche P.6.2.13.) et pour le diamètre moyen de Sauter (planche P.6.2.15.). Des profils sont extraits de ces résultats et sont présentés aux planches P.6.2.14. et P.6.2.16..

La dispersion du liquide dans la chambre, caractérisée par la fraction massique moyenne de liquide, ne diffère que peu d'un maillage à l'autre. Une différence existe au niveau de la pénétration liquide, légèrement plus faible avec le maillage fin, mais elle n'est pas significative car inférieure à 1% de la pénétration liquide. Les différences sont également très faibles lorsque l'on compare les diamètres moyens de Sauter obtenus avec les deux maillages. Ce constat signifie qu'avec le maillage grossier, le calcul est convergé en espace. La suite de l'étude qui concerne la modélisation de sprays Diesel avec et sans vaporisation (paragraphes 6.2 et 6.3) se fait dans le même domaine de calcul (se référer à la figure 6.8 pour les dimensions du domaine). C'est donc le maillage constitué de 66240 cellules qui sera utilisé.

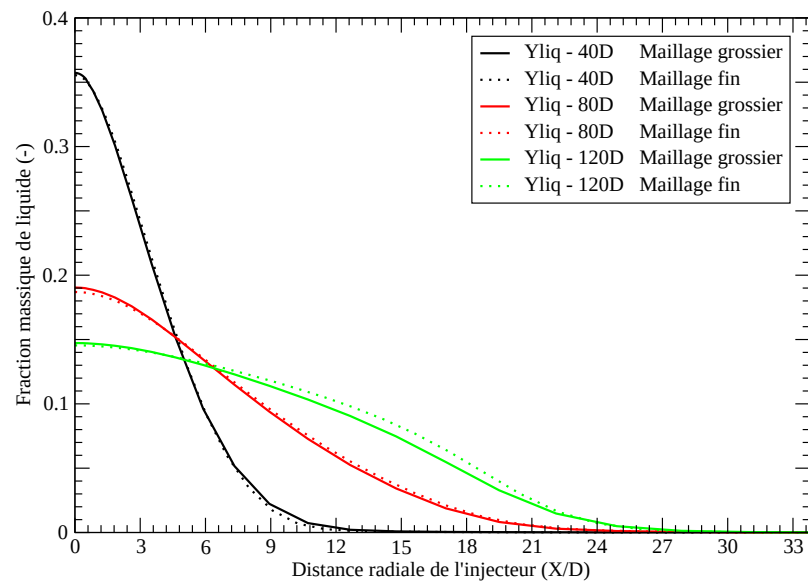
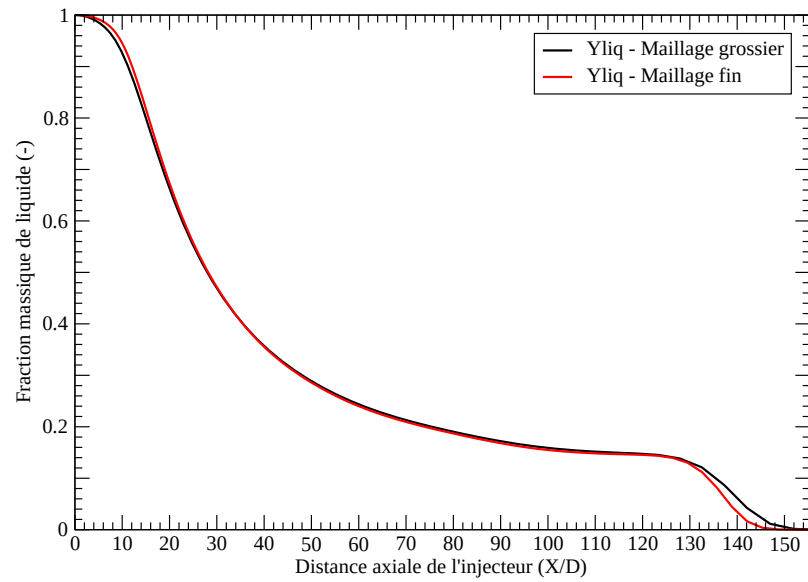
Maillage grossier



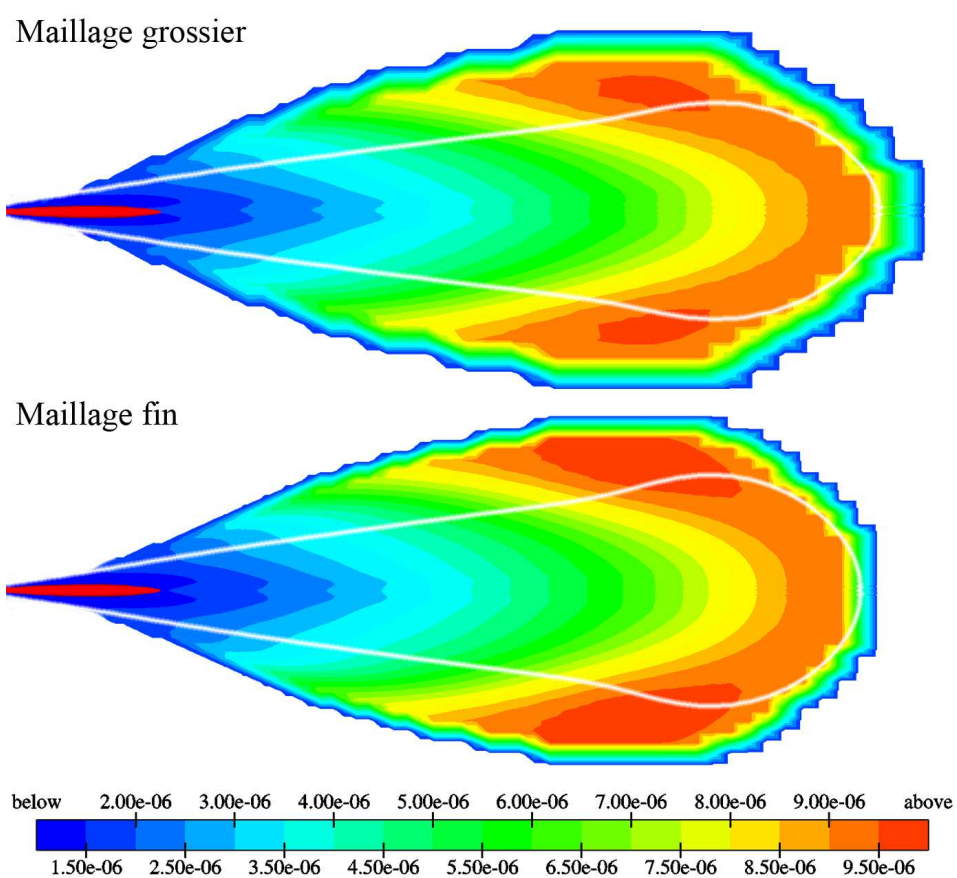
Maillage fin



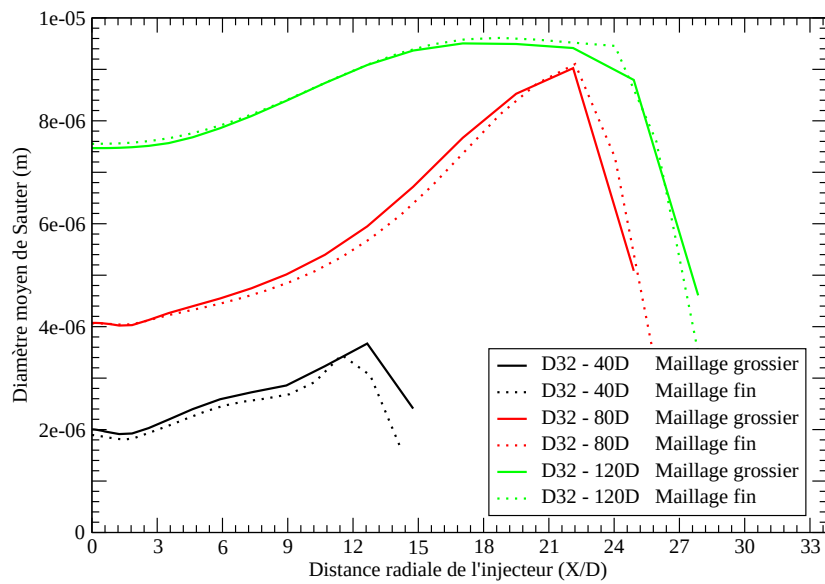
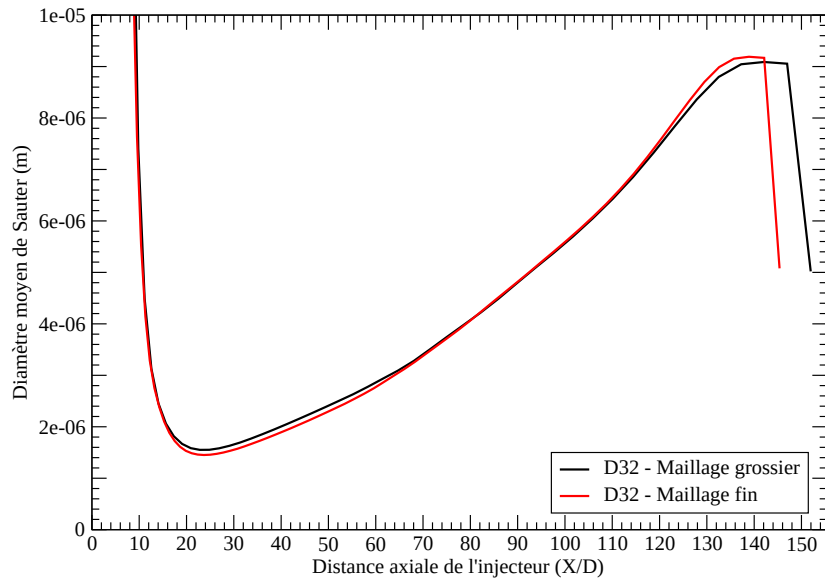
P.6.2.13. - Influence du niveau de raffinement du maillage sur la dispersion du liquide, représentée par la fraction massique moyenne de liquide $\tilde{Y}_l$ - $t = 0.7ms$



P.6.2.14. - Influence du niveau de raffinement du maillage sur les profils axiaux (en haut) et radiaux (en bas) de la fraction massique de liquide - $t = 0.7ms$



P.6.2.15. - Influence du niveau de raffinement du maillage sur la taille des gouttes du spray, représentée par le diamètre moyen de Sauter $D_{32} - t = 0.7ms$



P.6.2.16. - Influence du niveau de raffinement du maillage sur les profils axiaux (en haut) et radiaux (en bas) du diamètre moyen de Sauter D_{32} - $t = 0.7ms$

6.2.5 Influence du modèle de rupture secondaire

Dans cette partie, l'impact du phénomène physique de rupture secondaire sur la taille moyenne des gouttes est étudié. Deux calculs sont donc comparés ici : un premier avec le sous-modèle de rupture secondaire activé et un second sans l'activation du sous-modèle. Deux champs de diamètre moyen de Sauter sont proposés en figure P.6.2.17. et des profils sont extraits de ces champs et présentés en figure P.6.2.18..

D'après les calculs effectués avec le modèle *ELSA*, pour des injections de type Diesel à forts nombres de Weber et de Reynolds, l'effet de rupture secondaire des gouttes n'est pas très important. Ce phénomène physique agit principalement dans l'axe d'injection, à une distance de cinquante à soixante-dix diamètres de l'injecteur. Dans cette zone de l'écoulement, la vitesse relative liquide/gaz y est importante et pilote le phénomène de rupture secondaire. Pour des distances supérieures à soixante-dix diamètres, le régime de collisions/coalescences devient prépondérant (voir les champs de termes source présentés au paragraphe 4.2 pour une comparaison des ordres de grandeur). On retrouve ainsi les conclusions de Vallet *et al.* [79, 80] à savoir un phénomène de rupture prépondérant occasionné par les collisions entre gouttes. La rupture d'un jet liquide sous le régime de l'atomisation produit de fines gouttelettes dès la sortie de la zone dense. Si le sous-modèle d'atomisation secondaire n'est pas très influent dans le cas étudié ici, cela signifie que le modèle *ELSA* a tendance à prédire des tailles de structures liquides en sortie de zone dense déjà très proches du diamètre critique estimé par les corrélations de Pilch et Erdman [77]. D'ailleurs, le diamètre des structures liquides a plutôt tendance à augmenter au fur et à mesure que l'on s'éloigne de l'injecteur, lorsque les contraintes de turbulence et de cisaillement se relâchent.

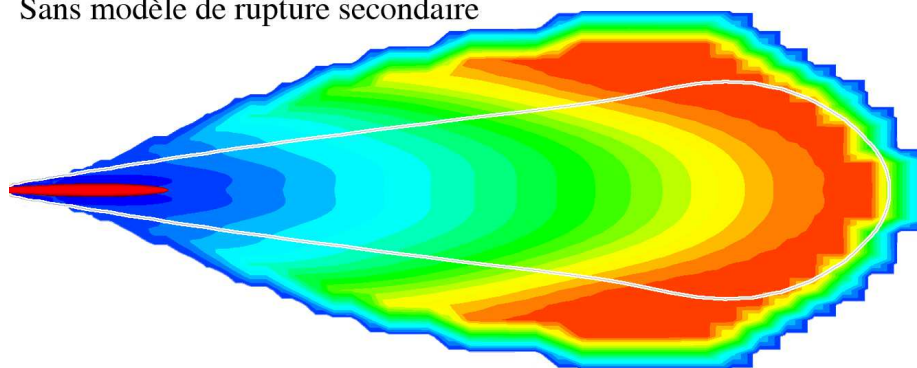
6.2.6 Bilan des calculs de sprays Diesel sans vaporisation

Le modèle *ELSA* a été validé en zone proche de l'injecteur à l'aide de calculs DNS (paragraphe 6.1). Sans modifier aucun paramètre numérique par la suite, la série de calculs présentée dans ce paragraphe 6.2 a permis d'établir les conclusions suivantes :

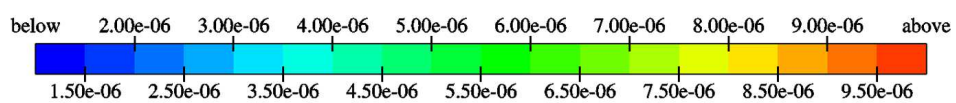
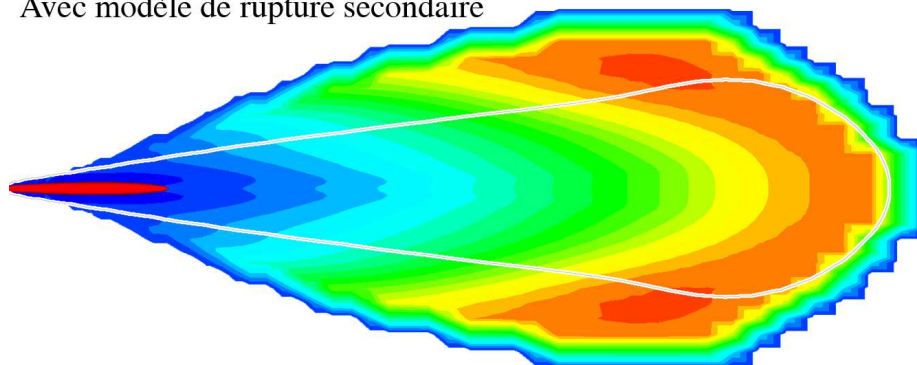
- pour des injections à très haute vitesse de type Diesel, la méthode d'hybridation Euler - Lagrange présentée au chapitre 5 n'a qu'une influence réduite sur le spray formé - il sera donc possible de faire l'économie du formalisme lagrangien en zone diluée dans la suite de cette étude ;
- un niveau d'intensité turbulente en sortie d'injecteur de l'ordre de 5% est une condition limite réaliste pour la simulation des sprays lorsque l'écoulement dans l'injecteur n'est pas étudié ;
- le maillage constitué de 66240 cellules suffit pour modéliser précisément l'injection du carburant, ce qui ne constitue pas un handicap trop important pour une utilisation du modèle dans un contexte industriel ;
- l'influence du phénomène de rupture secondaire est faible sur la taille des gouttes formées dans ces conditions d'injection.

La suite de l'étude concerne la modélisation de sprays vaporisant dans des conditions thermodynamiques proches de celles des chambres de combustion Diesel actuelles.

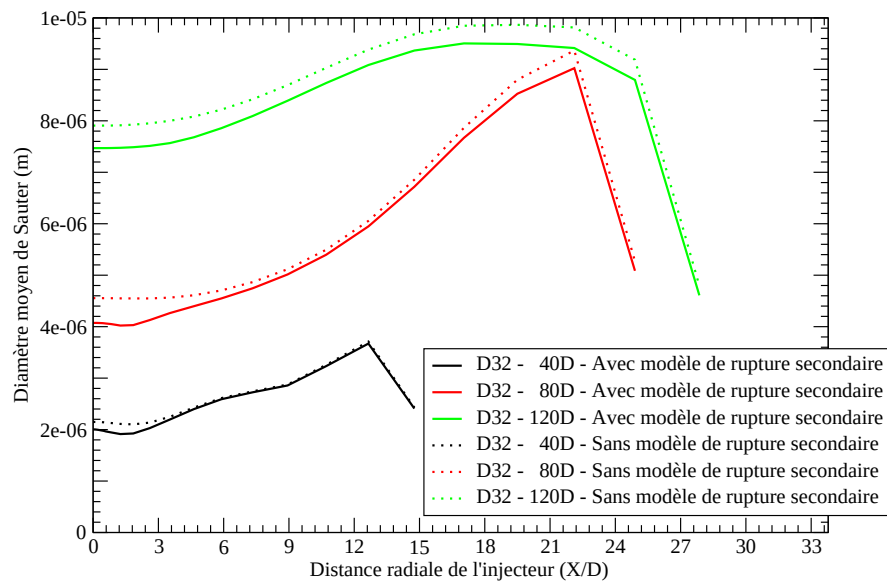
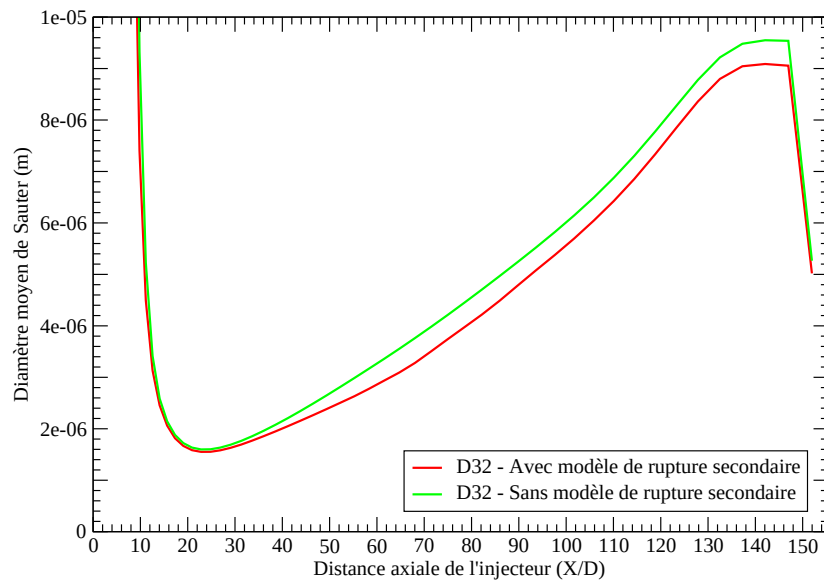
Sans modèle de rupture secondaire



Avec modèle de rupture secondaire



P.6.2.17. - Influence du modèle de rupture secondaire sur la taille des gouttes - $t = 0.7\text{ms}$



P.6.2.18. - Influence du modèle de rupture secondaire sur les profils axiaux (en haut) et radiaux (en bas) du diamètre moyen de Sauter D_{32} - $t = 0.7ms$

6.3 Calculs de sprays Diesel vaporisant

Ce paragraphe présente une étude comparative entre des mesures expérimentales et des calculs obtenus avec le modèle *ELSA* pour des injections Diesel vaporisant dans une chambre de combustion à hautes pression et température. Dans un premier temps, la base expérimentale est présentée. Ensuite, les conditions de calcul sont décrites et enfin, les résultats obtenus avec le modèle sont comparés aux mesures.

6.3.1 Présentation de la base expérimentale

La base expérimentale utilisée ici pour une étude comparative avec le modèle *ELSA* a été réalisée par le CMT *Motores Termicos* de Valence (Espagne) en vue d'une utilisation en interne PSA Peugeot Citroën. Des mesures de pénétrations liquide et vapeur sont obtenues pour deux types d'injecteurs, deux pressions d'injection ainsi que deux températures dans la chambre de combustion. Pour les deux types d'injecteur, le diamètre du trou est de $148\mu m$. Ces conditions sont résumées dans le tableau 6.2.

Injecteurs No	1	2
Pressions d'injection	$54MPa$	$180MPa$
Températures du gaz dans la chambre	$790K$	$935K$

TAB. 6.2 – Conditions expérimentales pour la mesure de pénétrations liquide et vapeur

Pour l'ensemble des mesures, la pression dans la chambre de combustion est de $7MPa$. En ce qui concerne les profils temporels de vitesse à la sortie de l'injecteur, ils ont été mesurés et sont présentés en figure 6.13, pour les deux injecteurs et les deux pressions d'injection. D'après cette figure et pour une faible pression d'injection, l'injecteur 2 a une levée d'aiguille beaucoup plus rapide. Cette différence avec l'injecteur 1 est intéressante dans le but de tester le caractère prédictif du modèle *ELSA*, au niveau des pénétrations liquide et vapeur mais aussi au niveau des champs de richesse obtenus.

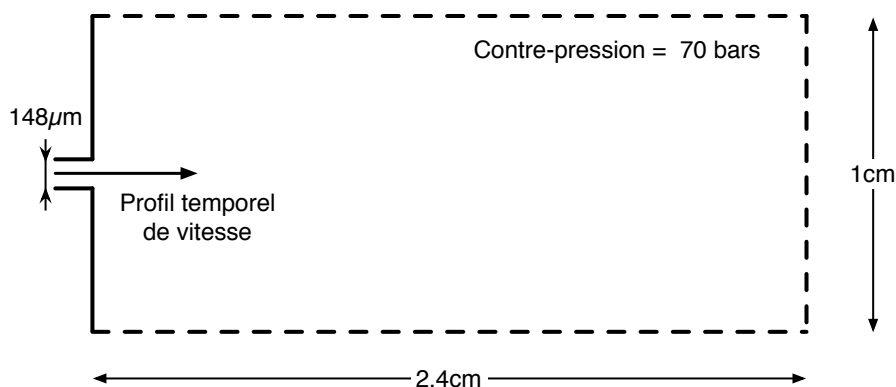


FIG. 6.12 – Dimensions de la chambre de combustion

Les dimensions de la chambre de combustion où sont effectuées les mesures de pénétrations liquide et vapeur sont données en figure 6.12.

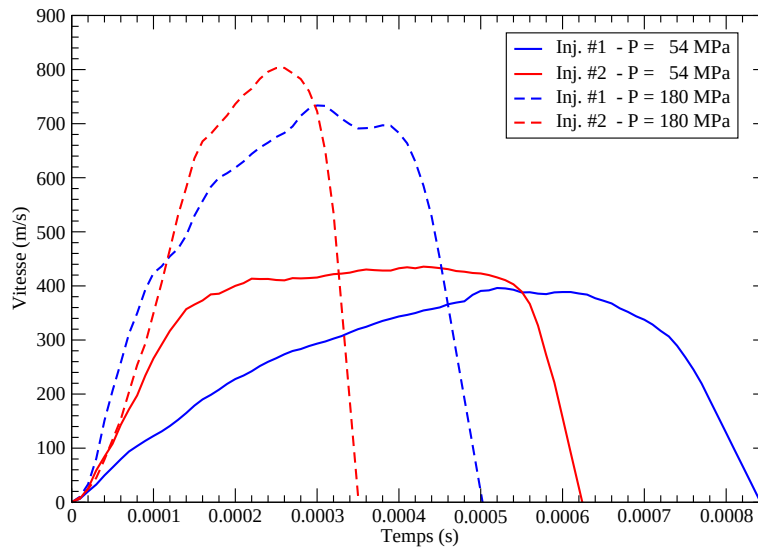


FIG. 6.13 – Profils temporels de vitesse mesurés à la sortie de la buse d'injection, en fonction de la pression d'injection et du type d'injecteur

Enfin, les mesures de pénétrations liquides sont effectuées par rétro-éclairage alors que les pénétrations vapeur sont obtenues par Schlieren.

6.3.2 Conditions de calcul

Le modèle *ELSA* est utilisé ici tel qu'il a été décrit au chapitres 3 et 4, sans utiliser la méthode de couplage hybride Euler - Lagrange. Aucun paramètre numérique ni nombre de Weber critique n'a été modifié depuis les premières validations en zone dense avec le calcul DNS et les calculs présentés au paragraphe 6.2. La modélisation eulérienne des échanges thermique et massique est activée pour cette partie de l'étude.

Le maillage utilisé pour ces calculs est celui composé de 66240 cellules, déjà présenté en figure 6.11 du paragraphe précédent, les dimensions du domaine de calcul étant les mêmes. L'influence du niveau de raffinement de maillage a donc déjà été évalué et ce maillage permet une convergence en espace satisfaisante. En ce qui concerne les pas de temps utilisés pour les différents calculs, ils sont choisis de telle manière qu'ils respectent le critère de CFL, en considérant la taille des cellules près de la buse d'injection et les profils temporels de vitesse d'injection. Ils sont présentés en figure 6.14, pour les deux types d'injecteur et les deux pressions d'injection.

Il est très difficile de mesurer à la sortie de l'injecteur le profil de fraction massique de liquide. De plus, aucune étude concernant l'écoulement dans l'injecteur n'a encore été menée. Il est donc supposé pour l'ensemble des calculs présentés ici qu'à la sortie de l'injecteur, l'écoulement n'est pas cavitant,

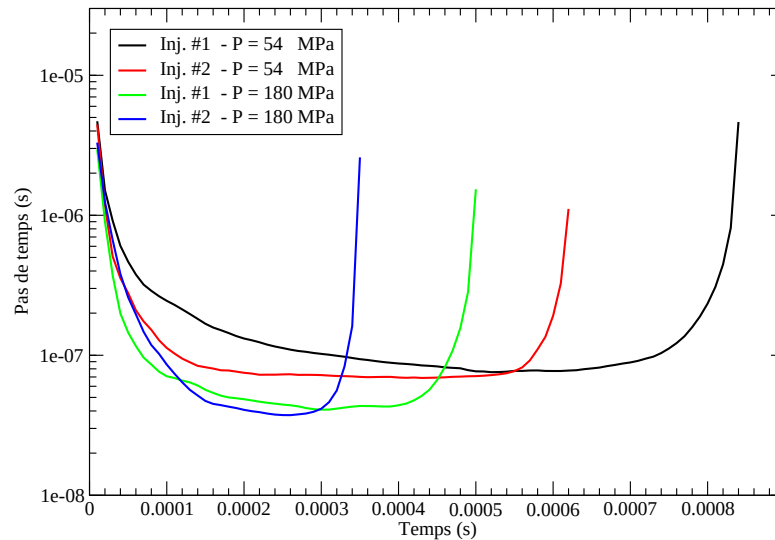


FIG. 6.14 – Evolution des différents pas de temps utilisés avec le modèle *ELSA* en fonction des conditions simulées

c'est-à-dire que la fraction massique de liquide est prise égale à 1 et la vitesse est supposée constante sur toute la section de sortie. Enfin, conformément aux différents essais menés au paragraphe 6.2, le niveau d'intensité turbulente est pris égal à 5% de la vitesse d'injection et l'échelle intégrale turbulente à 10% du diamètre du trou de l'injecteur.

6.3.3 Comparaisons avec les expériences

Les points de comparaison entre les mesures expérimentales et les calculs sont les pénétrations liquide et vapeur. Des critères pour déterminer ces pénétrations sont nécessaires. Ils sont inspirés de ceux habituellement choisis et sont résumés en figure 6.15.

Les planches P.6.3.19., P.6.3.20., P.6.3.21. et P.6.3.22. présentent les différentes pénétrations liquide et vapeur en fonction du temps et des conditions d'injection. En rouge sont tracées les pénétrations vapeur, en bleu les pénétrations liquides. Les symboles correspondent aux mesures expérimentales, les courbes en trait plein aux valeurs calculées par le modèle *ELSA*. Pour chaque graphe, un plateau est atteint en fin d'injection pour la pénétration vapeur. Cela correspond à l'impact du panache de vapeur sur la paroi située en face de l'injecteur, à une distance de 2.4cm .

Influence du profil temporel de vitesse sur les pénétrations A faible pression d'injection (54MPa), le profil temporel de vitesse joue un rôle significatif sur les pénétrations liquide et vapeur. En effet, l'injecteur 2 permet une pénétration plus rapide du spray et de son panache de vapeur dans la

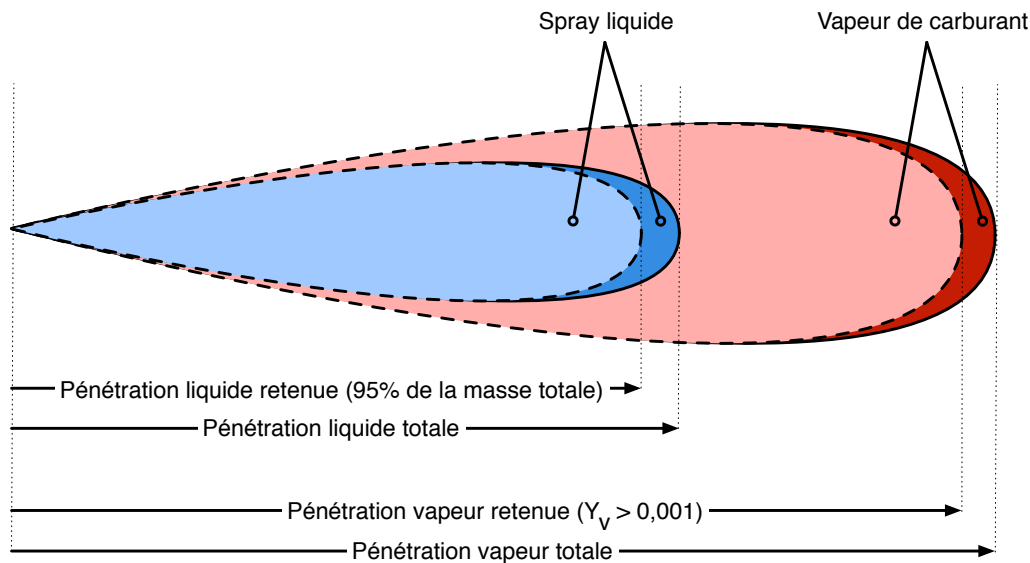


FIG. 6.15 – Critères de détermination des pénétrations liquide et vapeur obtenues avec le modèle *ELSA*

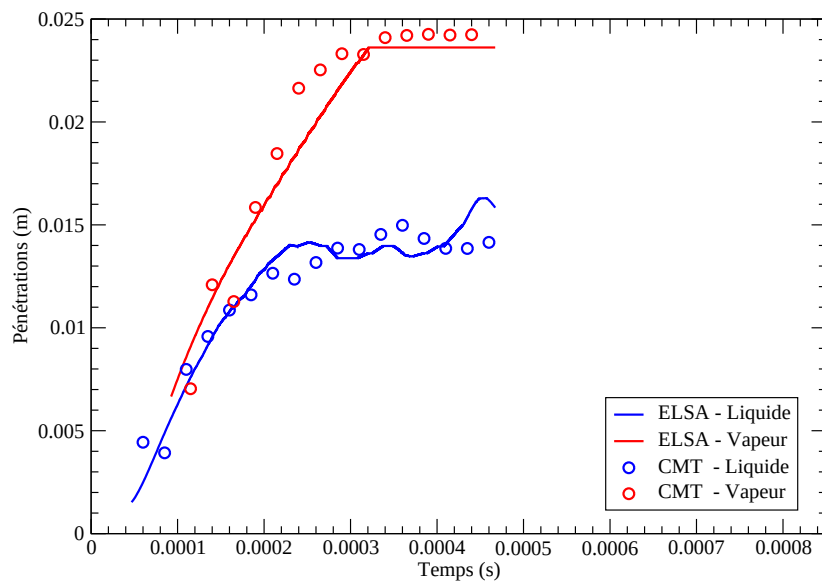
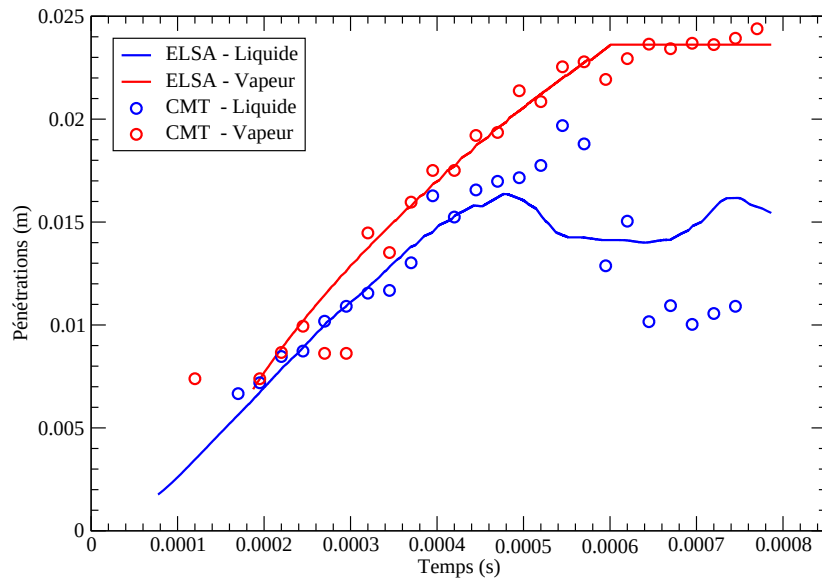
chambre de combustion. Cette différence est moins significative à forte pression d'injection (180MPa). Cette constatation était prévisible car les profils temporels de vitesse d'injection à forte pression sont très proches entre les injecteurs 1 et 2.

Pour les deux injecteurs, le modèle *ELSA* estime les pénétrations vapeur de façon précise. Les écarts entre les mesures et les calculs sont faibles. En ce qui concerne les pénétrations liquides, les résultats sont également proches des mesures expérimentales. A faible pression d'injection, les pénétrations liquides de l'injecteur 2 sont toutefois sous-estimées, que ce soit pour $T_g = 790\text{K}$ ou $T_g = 935\text{K}$.

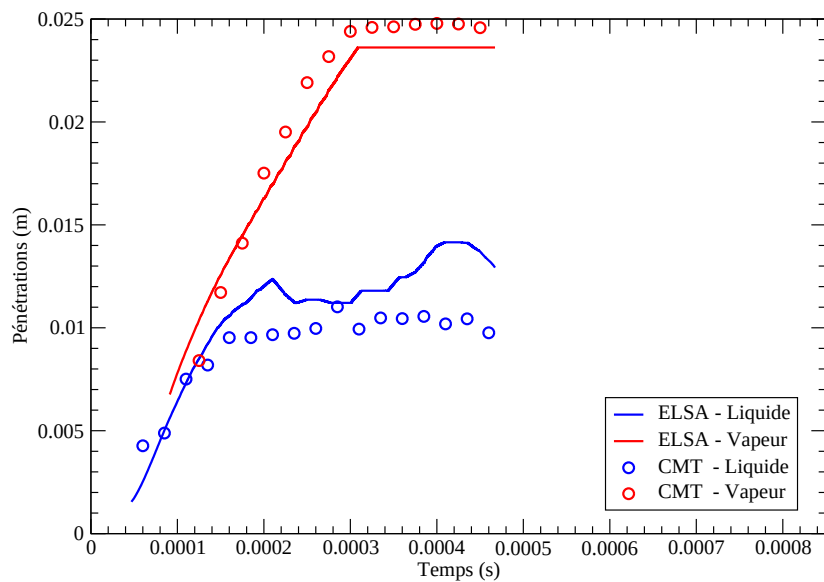
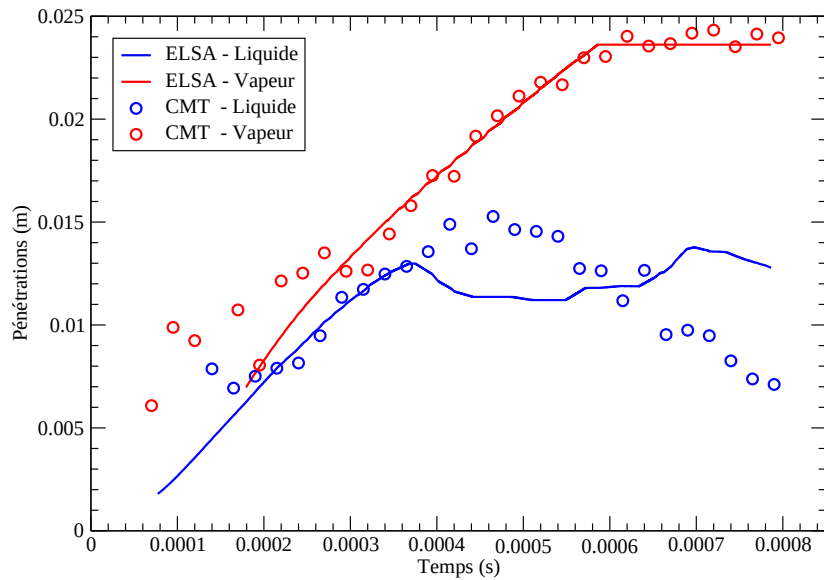
Influence de la pression d'injection sur les pénétrations Le fait d'augmenter la pression d'injection a un impact significatif pour l'injecteur 1. En effet, le spray ainsi que son panache de vapeur progressent plus rapidement dans la chambre de combustion. L'effet est plus nuancé pour l'injecteur 2 qui dispose déjà d'une levée d'aiguille rapide et donc d'un profil temporel de vitesse raide au début de l'injection. Les pénétrations liquides en régime établi sont peu changées lorsque la pression d'injection est augmentée, conformément aux mesures expérimentales. Le fait d'augmenter la pression d'injection permet d'obtenir un spray qui génère des gouttes plus petites qui vaporisent mieux. En effet, en augmentant la pression d'injection, la vitesse est également augmentée. Avec un temps de vaporisation constant, la pénétration liquide serait alors plus grande. Or, en augmentant la vitesse, la taille des gouttes formées est diminuée, ce qui réduit donc le temps de vaporisation et la pénétration liquide. Les deux phénomènes se contre-balancent, ce qui limite les variations de la pénétration liquide lorsque la pression d'injection est changée.

Influence de la température dans la chambre sur les pénétrations Conformément aux mesures expérimentales, le fait de changer la température dans la chambre de combustion ne change

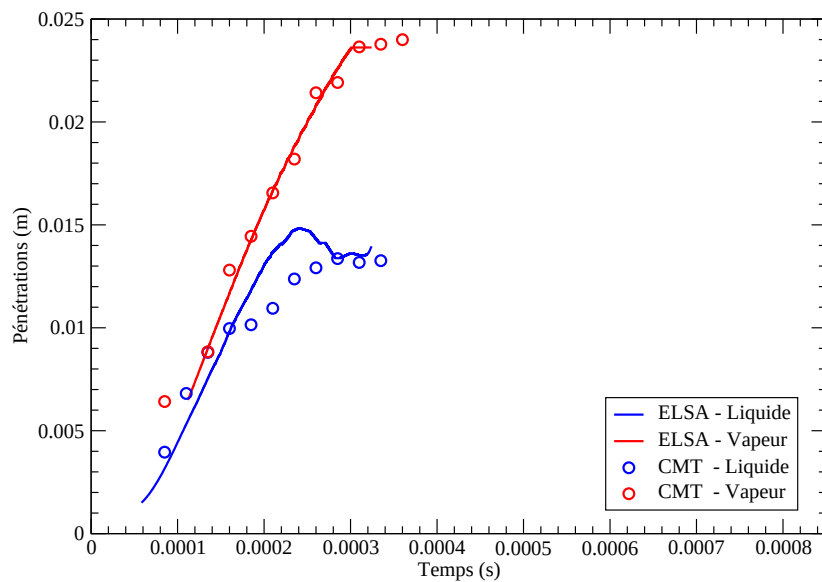
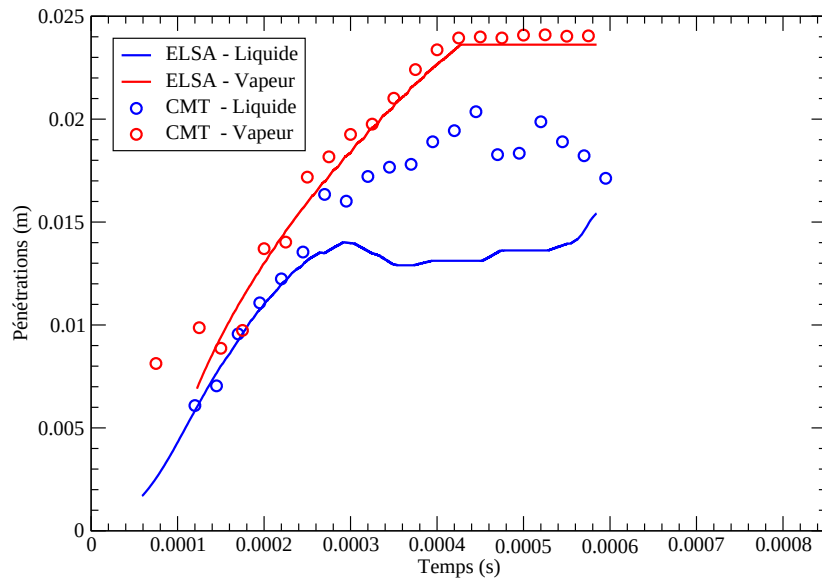
pas les pénétrations vapeur. Cependant, les pénétrations liquides sont différentes. En effet, avec une température plus importante ($935K$), la vaporisation des gouttelettes est plus efficace, ce qui se traduit par des pénétrations liquides en régime établi plus faibles. Cet effet est également capté par le modèle *ELSA* qui prédit des pénétrations liquides assez proches des mesures expérimentales.



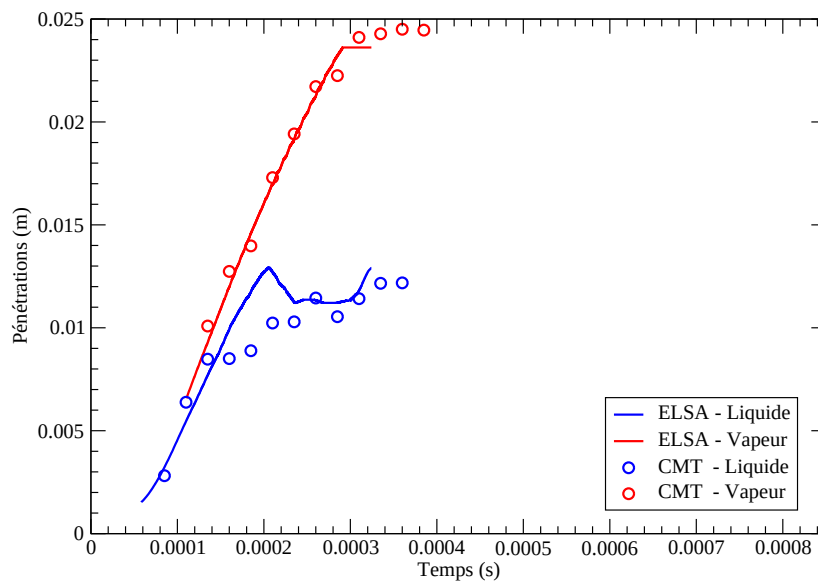
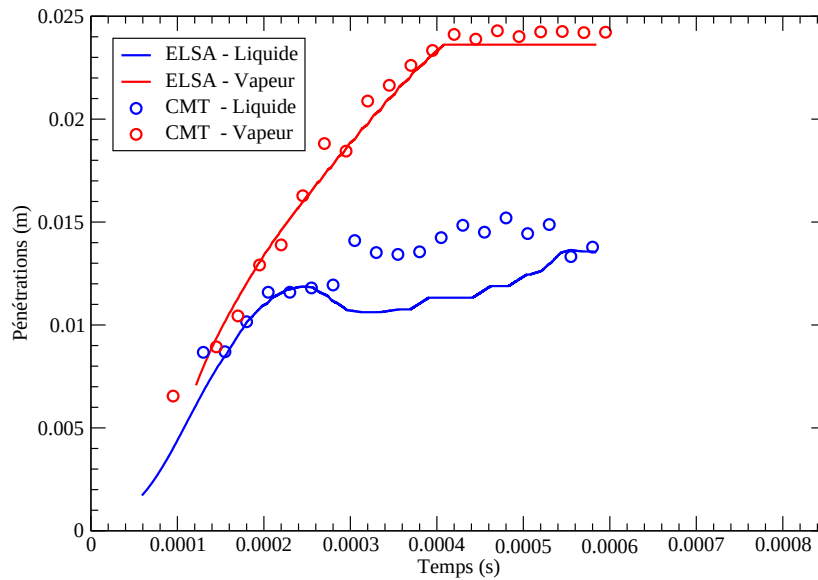
P.6.3.19. - Comparaisons entre les expériences du CMT de Valence et les calculs obtenus avec le modèle *ELSA* pour l'injecteur 1 à une température de $790K$: la ligne du dessus présente les résultats avec une pression d'injection de $54MPa$, la ligne du dessous avec une pression d'injection de $180MPa$



P.6.3.20. - Comparaisons entre les expériences du CMT de Valence et les calculs obtenus avec le modèle *ELSA* pour l'injecteur 1 à une température de $935K$: la ligne du dessus présente les résultats avec une pression d'injection de $54MPa$, la ligne du dessous avec une pression d'injection de $180MPa$



P.6.3.21. - Comparaisons entre les expériences du CMT de Valence et les calculs obtenus avec le modèle *ELSA* pour l'injecteur 2 à une température de $790K$: la ligne du dessus présente les résultats avec une pression d'injection de $54MPa$, la ligne du dessous avec une pression d'injection de $180MPa$



P.6.3.22. - Comparaisons entre les expériences du CMT de Valence et les calculs obtenus avec le modèle *ELSA* pour l'injecteur 2 à une température de $935K$: la ligne du dessus présente les résultats avec une pression d'injection de $54MPa$, la ligne du dessous avec une pression d'injection de $180MPa$

Les planches P.6.3.23. et P.6.3.24. présentent les champs de richesse pour les différentes conditions simulées dans cette partie de l'étude. Ces champs sont obtenus $0.3ms$ après le début d'injection. Ils mettent en évidence des différences fortes entre les conditions d'injection, notamment sur la localisation des poches de richesse et l'impact de la température du gaz sur le panache de vapeur. En effet, le fait d'augmenter la température du gaz ne modifie pas la pénétration vapeur mais modifie fortement les niveaux de richesse. Un environnement gazeux plus chaud signifie une vaporisation plus efficace et des zones de richesse élevée. Plusieurs explications sont possibles :

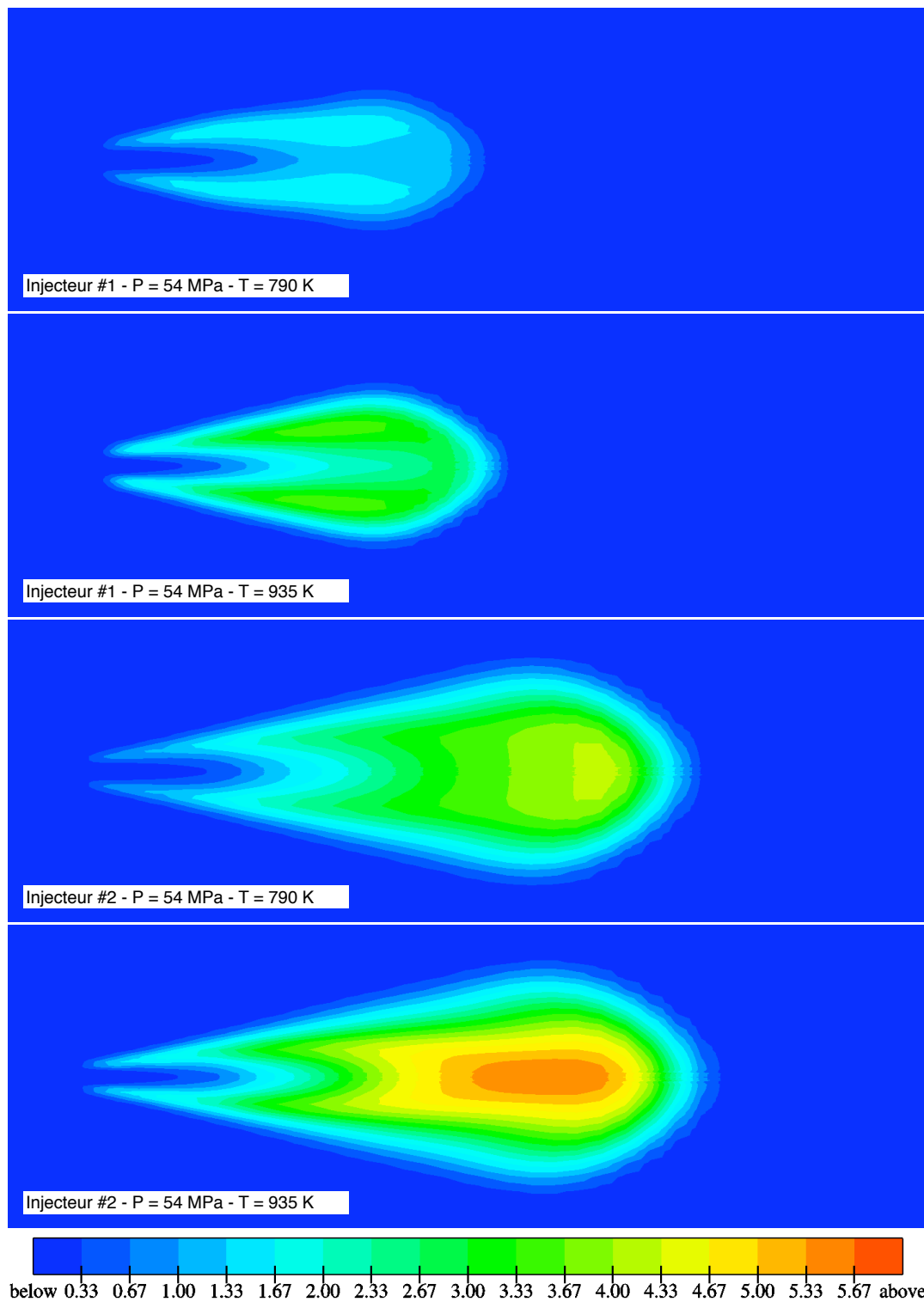
- un environnement plus chaud entraîne une température de la phase liquide plus importante, y compris au niveau de l'interface liquide/gaz, ce qui a pour conséquence un accroissement de la pression de saturation et donc du niveau de richesse local ;
- une vaporisation plus efficace a tendance à diminuer la taille de la zone dense près de l'injecteur, ce qui provoque une diminution de l'entraînement d'air et donc une richesse globale accrue.

De plus, la prise en compte par le modèle *ELSA* de la zone dense du spray, près de la buse d'injecteur, apparaît clairement ici. Dans cette région du spray, la richesse est proche de zéro : ceci est principalement dû à un régime de saturation en vapeur très rapidement atteint de part la faible quantité (voire l'absence) d'air et une inertie thermique importante de la phase liquide. La très faible présence d'air empêche également des échanges thermiques importants entre les deux phases.

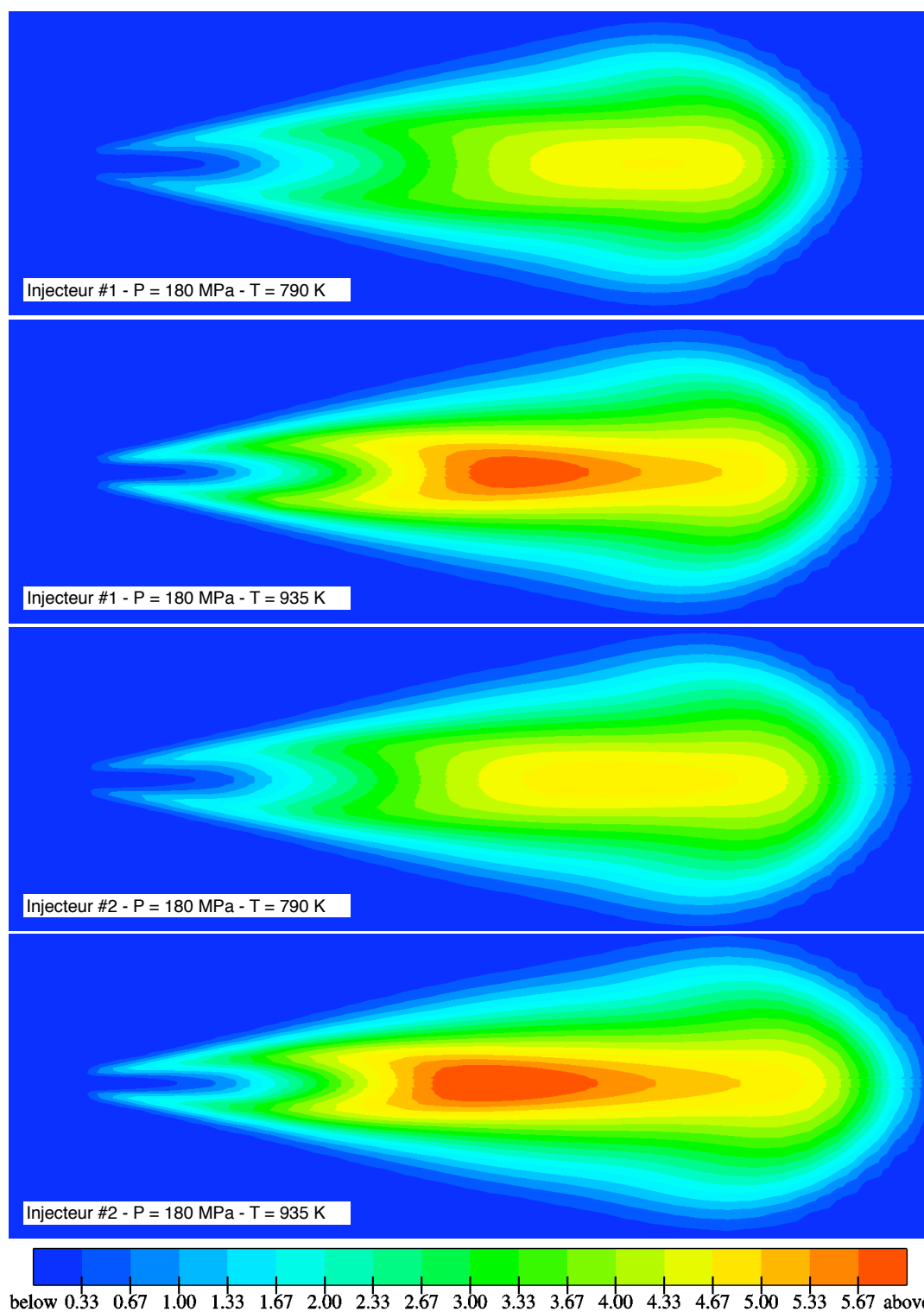
6.3.4 Bilan des calculs de sprays Diesel avec vaporisation

Pour l'ensemble des conditions simulées, le modèle *ELSA* prédit convenablement les pénétrations liquides et estime de façon précise les pénétrations vapeur. Ces résultats sont obtenus pour de faibles et de fortes pressions d'injection Diesel, pour deux types d'injecteur (profils temporels de vitesse différents) et pour deux températures de chambre de combustion.

Les mesures disponibles se limitent aux pénétrations. Il aurait été intéressant de comparer les tailles de gouttes calculées avec des données expérimentales mais les difficultés liées à la densité du spray et la température dans la chambre rendent ces mesures très délicates. Cependant, la loi de vaporisation étant basée sur la taille des gouttes, le fait de prédire correctement, sans calage préalable de paramètres numériques, les pénétrations liquides de sprays vaporisant sur une plage de variations thermodynamiques laisse espérer que les tailles de gouttes calculées sont réalistes.



P.6.3.23. - Champs de richesse pour une pression d'injection de 540bars pour les deux différents types d'injecteur ainsi que deux températures de chambre de combustion - $t = 0.3ms$



P.6.3.24. - Champs de richesse pour une pression d'injection de 1800bars pour les deux différents types d'injecteur ainsi que deux températures de chambre de combustion - $t = 0.3ms$

6.4 Calculs de sprays Diesel en combustion

Dans le but d'une utilisation industrielle, le modèle *ELSA* a été implémenté de telle sorte qu'il soit utilisable avec les modèles de combustion du code de *CFD* utilisé par PSA Peugeot Citroën. Cette partie de l'étude présente donc des résultats obtenus pour des sprays Diesel en combustion. En premier lieu, le modèle de combustion utilisé est brièvement décrit. Ensuite, des résultats de calculs illustrant l'influence de la taille du trou de l'injecteur sur la combustion dans la chambre sont présentés. Enfin, un cas de validation est proposé, en comparaison avec des données expérimentales pour un spray en régime stationnaire.

6.4.1 Présentation du modèle de combustion

Le modèle choisi pour cette étude est le modèle ECFM-3Z [112]. Ce modèle, développé dans le but de modéliser la combustion prémélangée parfaitement ou partiellement, est adapté à la simulation de la combustion par flammes de diffusion (combustion se produisant dans une zone de réaction mince séparant le carburant du comburant) rencontrée en moteur Diesel par exemple. Ce modèle est basé d'une part sur la résolution d'une équation de transport de la densité de surface de flamme prenant en considération le plissement du front de flamme engendré par les effets turbulents, et d'autre part sur une méthode de conditionnement assurant une reconstruction précise des propriétés locales des gaz frais et brûlés, même dans des cas très fortement stratifiés.

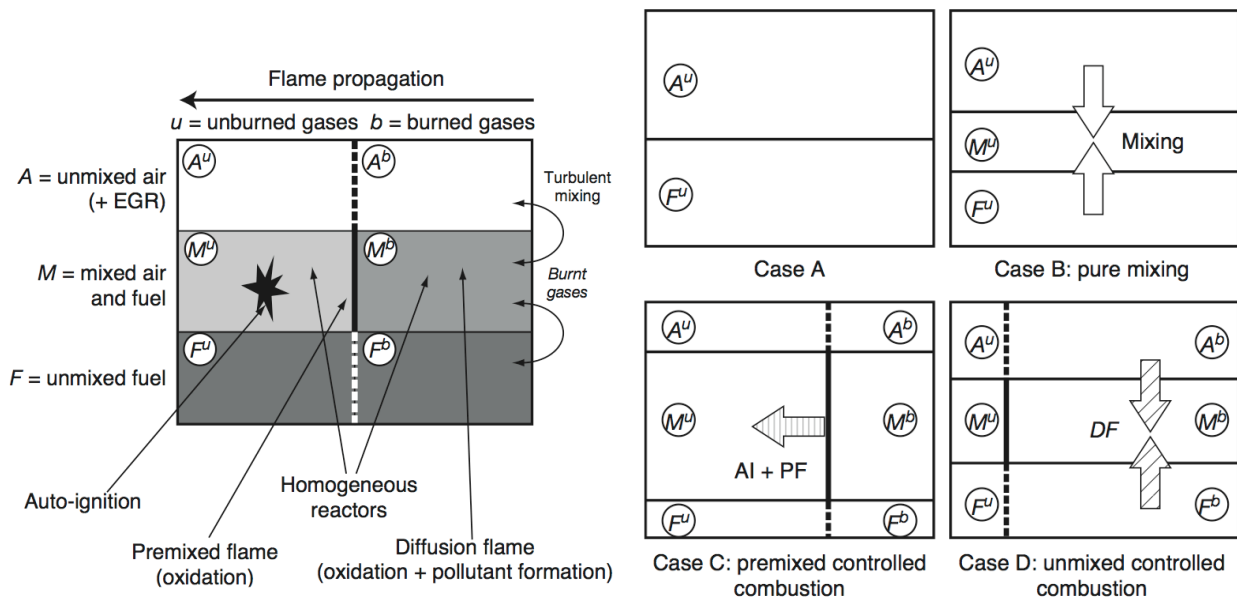


FIG. 6.16 – Schémas illustrant le fonctionnement du modèle ECFM-3Z [112]

Afin d'adapter le modèle à la combustion par flamme de diffusion, une description de l'évolution de l'état du mélange a été ajoutée. Cette description consiste à distribuer les gaz contenus dans tout volume de contrôle (typiquement une maille de la grille de calcul 3D) en trois zones (figure 6.16)

caractérisées par des niveaux de mélange différents : une zone de carburant pur, une zone d'air pur avec d'éventuels gaz résiduels et une zone dans laquelle le carburant et l'air sont parfaitement mélangés. Ces trois zones ne sont pas définies géométriquement, elles correspondent à une répartition du fluide en trois états. Dans la zone de mélange air/carburant, le modèle de combustion ECFM-3Z est appliqué. L'évolution de l'état du mélange est gérée par un modèle phénoménologique de type Magnussen [113], assurant le mélange progressif du carburant et de l'air (passage des deux zones non mélangées vers la zone mélangée). Enfin ce modèle est couplé avec un modèle d'auto-inflammation.

6.4.2 Influence de la taille du trou de l'injecteur

La tendance actuelle en conception moteur est la diminution du diamètre des trous de l'injecteur. A pression d'injection équivalente, une diminution de la section de sortie de l'injecteur entraîne une augmentation de la vitesse du liquide. Cela permet d'obtenir des sprays composés de gouttes plus petites qui vaporisent plus rapidement. Au niveau de la combustion, des taux de dégagement de chaleur plus importants sont ainsi attendus. L'influence de la taille du trou sur la combustion dans la chambre est délicate à prédire avec les logiciels de *CFD* actuels, basés sur un formalisme lagrangien pour la modélisation des sprays. Les maillages utilisés avec ce type de formalisme étant grossiers en zone proche de l'injecteur, les effets de l'entraînement d'air sur le mélange carburant/comburant sont alors mal décrits. Il a donc été décidé de tester sur ce point le comportement du modèle *ELSA*, couplé au modèle de combustion ECFM-3Z.

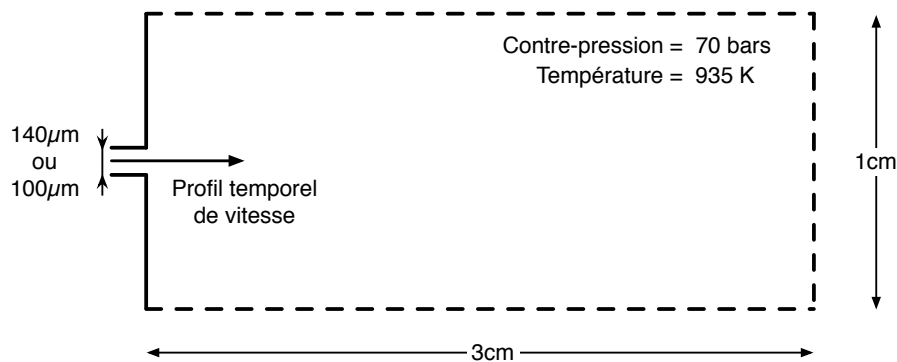


FIG. 6.17 – Dimensions du domaine de calcul

Les trois calculs présentés dans ce paragraphe concernent les mêmes conditions initiales de chambre à savoir une température des gaz de l'ordre de $935K$ et une pression de $7MPa$. Les dimensions du domaine de calcul sont résumées en figure 6.17.

Le premier calcul ("référence") correspond au cas d'une pression d'injection de $100MPa$, une durée d'injection d'une milliseconde et un trou d'injecteur de $140\mu m$. Le second calcul ("iso-durée") est effectué pour un diamètre de $100\mu m$, la même pression d'injection de $100MPa$ et la même durée d'injection d'une milliseconde. Le troisième calcul ("iso-vitesse") est également fait pour un diamètre de $100\mu m$ mais la pression d'injection est diminuée de telle manière que la vitesse de liquide maximale

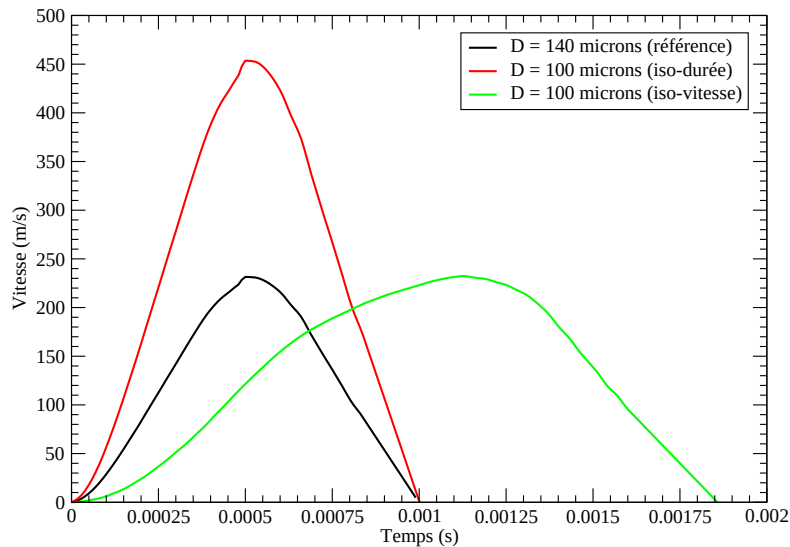


FIG. 6.18 – Profils temporels de vitesses pour les trois différents cas d’injection considérés

durant l’injection soit la même que celle du cas de référence. Ces trois calculs se faisant à masse injectée égale (11mg), la durée d’injection du cas “iso-vitesse” est augmentée. Les profils temporels de vitesse à la sortie de l’injecteur sont donnés en figure 6.18. Quelque soit le cas de calcul, le niveau de turbulence en sortie d’injecteur est fixé à 5% de la vitesse et l’échelle intégrale turbulente à 10% du diamètre du trou de l’injecteur.

Les résultats obtenus permettent de dégager des tendances. Tout d’abord, sans changer la durée d’injection et en injectant la même quantité de carburant à travers un orifice plus petit (profil temporel “iso-durée”), le modèle *ELSA* couplé au modèle de combustion *ECFM-3Z* prédit un taux de dégagement de chaleur beaucoup plus important sur une période plus courte, comme le montre la figure 6.19. A l’opposé, le fait de baisser la pression d’injection pour conserver la même vitesse maximale (profil temporel “iso-vitesse”) entraîne un taux de dégagement de chaleur plus faible sur une période plus longue.

Le fait d’augmenter la vitesse d’injection entraîne une diminution de la taille des structures qui se détachent du cœur liquide et donc une augmentation du taux de vaporisation global. Une vitesse d’injection plus importante permet également d’augmenter l’entraînement d’air, ce qui a pour conséquence de mélanger plus rapidement le carburant vapeur et l’air. La combustion se trouve donc accélérée.

Par contre, le fait de conserver la vitesse maximale tout en diminuant la taille du trou de l’injecteur ne modifie que peu la taille des structures liquides expulsées de la zone dense du jet. Les échelles de temps caractéristiques des phénomènes d’évaporation et de mélange sont alors similaires. Or, le temps d’injection étant fortement augmenté, la combustion est retardée.

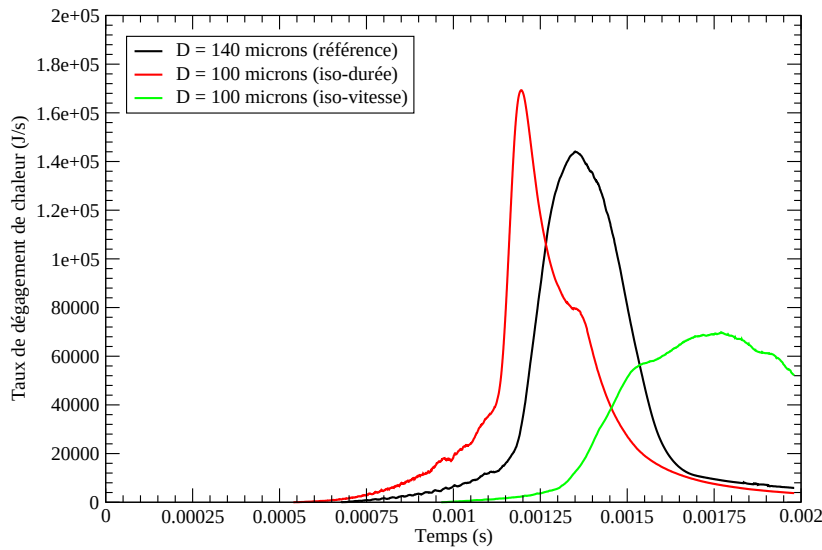


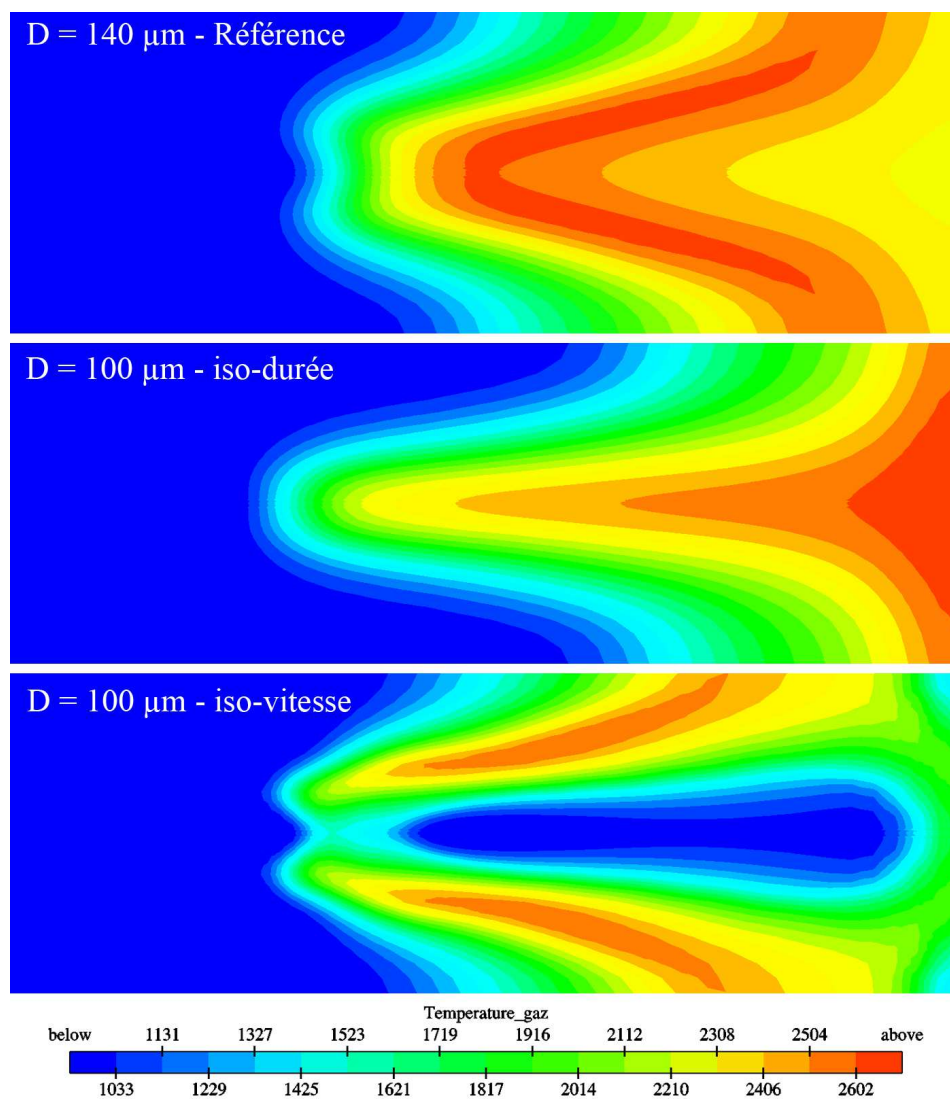
FIG. 6.19 – Taux de dégagement de chaleur pour les trois différents cas d'injection considérés

Le délai d'auto-inflammation est également impacté par le diamètre du trou et le profil temporel de vitesse qui en découle. Avec le profil de "référence", le délai est d'environ $\Delta t_{ref} = 0.67ms$. En diminuant la taille du trou tout en conservant la pression et la durée d'injection, ce délai descend à $\Delta t_{iso-d} = 0.54ms$. Enfin, pour le cas "iso-vitesse", le modèle prédit un délai d'auto-inflammation plus important : $\Delta t_{iso-v} = 0.96ms$.

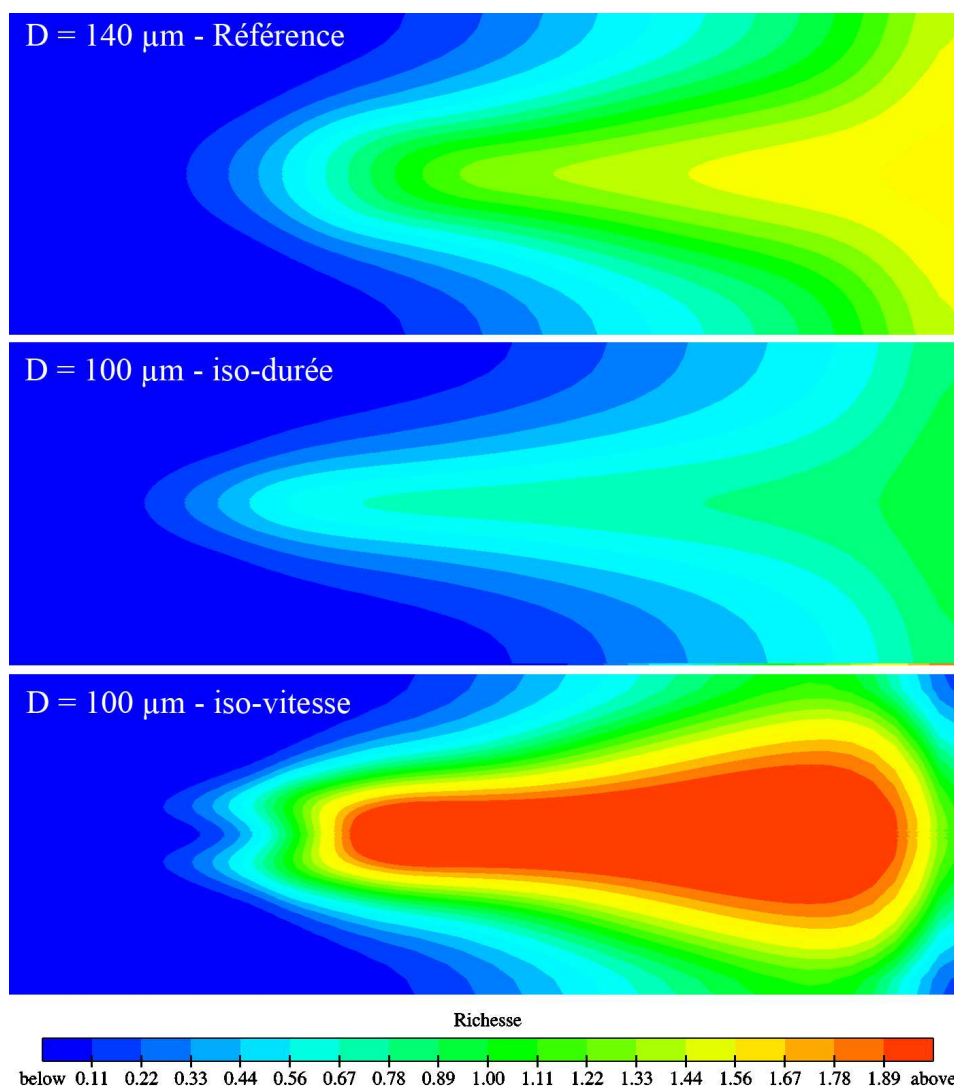
La contre-pression dans la chambre ainsi que la température des gaz font qu'un régime transitoire de combustion de type "flamme froide" est observable pour chacun des trois cas étudiés : le taux de dégagement de chaleur croît lentement dans un premier temps pour ensuite accélérer brutalement.

Les planches P.6.4.25. et P.6.4.26. présentent respectivement les champs de température et de richesse pour les trois différents cas considérés ici, deux millisecondes après le début de l'injection.

Un délai d'auto-inflammation plus faible cumulé à une courte période de fort taux de dégagement de chaleur font que la flamme du cas "iso-durée" est plus étroite que celle du cas de "référence" et que l'on est en fin de combustion (niveaux de richesse plus faibles également). En ce qui concerne le cas "iso-vitesse", les niveaux de richesse sont beaucoup plus importants. De plus, l'injection a duré près de deux millisecondes, le spray a donc sensiblement refroidit le gaz dans la chambre. Cumulé à un délai d'auto-inflammation plus long, la flamme n'a donc pas eu le temps de progresser suffisamment dans la chambre de combustion pour brûler la poche de carburant située dans l'axe d'injection.



P.6.4.25. - Champs de température pour les trois différents cas d'injection considérés - $t = 2\text{ms}$



P.6.4.26. - Champs de richesse pour les trois différents cas d'injection considérés - $t = 2ms$

6.4.3 Calculs sur la base expérimentale de Siebers

Higgins et Siebers [114] proposent une étude expérimentale sur la combustion de sprays Diesel en se focalisant principalement sur la distance de *lift-off* ainsi que la forme des flammes obtenues en fonction des conditions thermodynamiques dans la chambre. Les mesures sont effectuées pour une seule buse d'injection dont le trou a un diamètre de $180\mu\text{m}$ et une seule vitesse d'injection de l'ordre de 560m/s (pression d'injection de 138MPa). Les données sont recueillies six millisecondes après le début de l'injection, afin d'étudier le régime stationnaire de combustion.

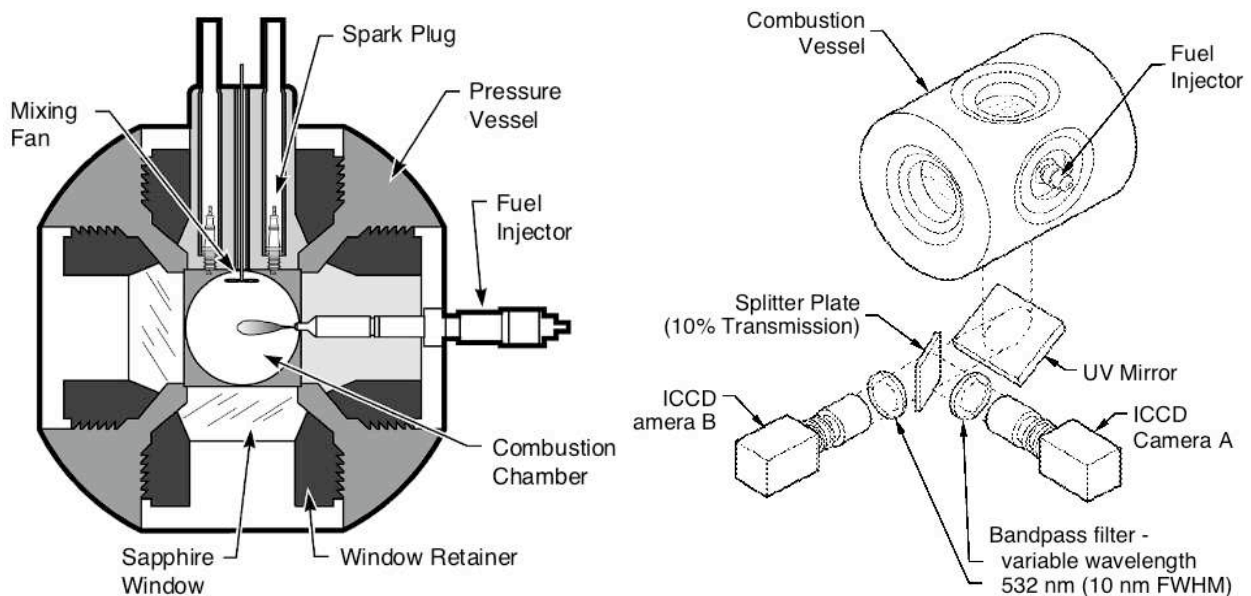


FIG. 6.20 – Schéma du dispositif expérimental utilisé par Higgins et Siebers [114]

Le positionnement et la forme des flammes sont obtenus par chimiluminescence OH *via* deux caméras CCD filtrées. Un schéma du dispositif expérimental est présenté en figure 6.20. Il est à noter que les champs obtenus expérimentalement sont intégrés dans l'espace car ils correspondent à une visualisation en trois dimensions du front de flamme.

Les conditions thermodynamiques de référence dans la chambre sont une température de 1000K et une densité de 14.8kg/m^3 . Deux autres essais sont considérés dans cette étude comparative : un premier où la température des gaz est montée à 1200K et un second où c'est la densité des gaz qui est augmentée à 58.5kg/m^3 . Ceci permet de mettre en évidence l'impact d'une augmentation de température ou d'une augmentation de la contre-pression sur le positionnement et la forme de la flamme obtenue.

Trois calculs, effectués avec le modèle *ELSA* couplé au modèle de combustion ECFM-3Z, sont donc présentés. Le niveau de turbulence en sortie d'injecteur est fixé à 5% de la vitesse et l'échelle intégrale turbulente est prise égale à 10% du diamètre de l'injecteur. Les dimensions du calcul sont données en figure 6.21. Le maillage utilisé est constitué de 130000 cellules.

Les figures 6.22 et 6.23 mettent en évidence les différences entre les images moyennées obtenues

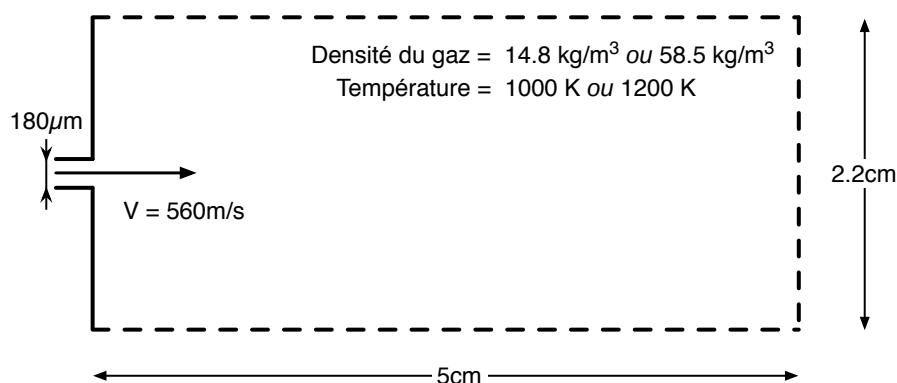


FIG. 6.21 – Dimensionnement du domaine de calcul pour la mise en évidence des distances de *lift-off*

lors des expérimentations et les champs de fraction massique Y_{OH} obtenus par le calcul. Le trait blanc correspondant à la distance de *lift-off* retenue par Higgins et Siebers [114] est reporté sur les champs de valeurs calculées. Afin de représenter le spray liquide dans son ensemble, une iso-surface de fraction massique de liquide $\tilde{Y}_l = 0.01$ est ajoutée (fraction volumique de liquide équivalente de l'ordre de 0.1%).

Influence de la température du gaz environnant En augmentant la température dans la chambre, Higgins et Siebers ont observé une diminution de la distance de *lift-off*, passant de $L_{lift-off} = 2.2cm$ à $L_{lift-off} = 1.3cm$. La figure 6.22 montre également qu'en augmentant la température dans la chambre, une flamme moins large est obtenue.

La présence de radicaux OH permet de situer le front de flamme. Le champ de fraction massique Y_{OH} obtenu avec le modèle permet donc de situer la flamme et d'en déduire une distance de *lift-off*. Le modèle *ELSA* couplé avec le modèle de combustion ECFM-3Z semble donc donner les bonnes tendances. En effet, pour le cas à $T_g = 1000K$, cette distance est légèrement surestimée par rapport aux mesures mais lorsque la température est prise égale à $1200K$, le modèle répond correctement et prédit un positionnement de flamme assez précis. La distance de *lift-off* est alors estimée aux alentours de $1.5cm$ et la forme de la flamme est similaire à celle obtenue expérimentalement.

Influence de la densité du gaz environnant En conservant la même température, une augmentation de la densité du gaz entraîne une forte diminution de la distance de *lift-off*. Higgins et Siebers l'ont mesuré à $L_{lift-off} = 0.75cm$. La flamme obtenue est également plus étroite.

Cette tendance est également captée par le modèle avec une distance de *lift-off* calculée aux alentours de $0.9cm$. L'augmentation importante de la pression dans la chambre a également un effet sur le spray liquide dont la pénétration est fortement diminuée. Enfin, la largeur de flamme prédite par le modèle est en accord avec les mesures expérimentales.

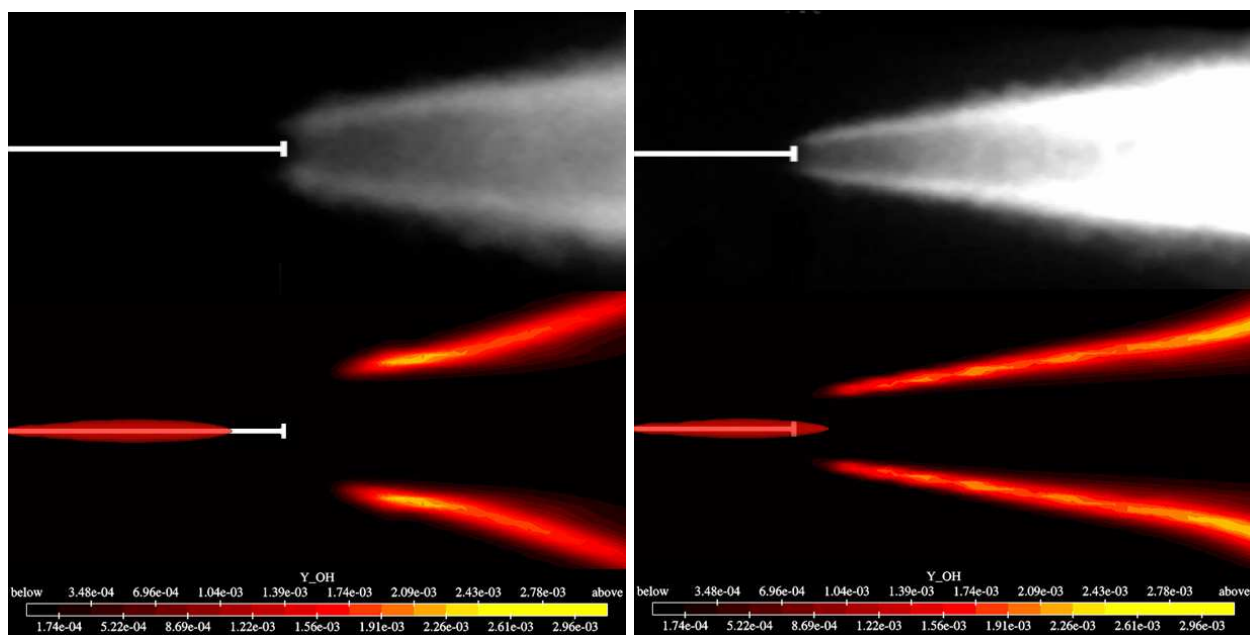


FIG. 6.22 – Comparaisons à $T_g = 1000K$ (à gauche) et $T_g = 1200K$ (à droite) entre les calculs obtenus avec le modèle *ELSA* couplé avec le modèle de combustion ECFM-3Z et les mesures expérimentales obtenues par chimiluminescence OH - l'indicateur blanc correspond à la distance de *lift-off* mesurée expérimentalement - le spray liquide est représenté à l'aide de l'iso-surface rouge où $\tilde{Y}_l = 0.01$

6.4.4 Bilan des calculs de sprays Diesel en combustion

Dans cette dernière partie, des résultats de calculs ont été présentés concernant des cas de sprays Diesel en combustion. Ces calculs ont été effectués avec le modèle *ELSA* couplé au modèle de combustion ECFM-3Z. Tout d'abord, une étude a été menée concernant l'influence de la taille du trou de l'injecteur sur la combustion. De fortes différences ont été observées sur l'évolution temporelle des taux de dégagement de chaleur prédits par le modèle. Des comportements différents ont également été obtenus au niveau des champs de richesse. Ensuite, une étude comparative avec des données expérimentales sur le positionnement de flamme en régime stationnaire a été présentée. Les résultats obtenus avec le modèle sont assez proches des expériences et laissent présager un caractère prédictif du modèle.

6.5 Conclusions sur les validations du modèle *ELSA*

Le chapitre 6 consistait à présenter les différentes études menées durant cette thèse en vue d'une validation du modèle *ELSA* et de son implémentation dans le code de *CFD* AVL Fire.

La première partie de l'étude concernait la validation du modèle en zone dense, près de la buse d'injection, grâce à des comparaisons quantitatives avec une base de données obtenue par simulation numérique directe et fournie par Ménard *et al.* [21]. Les résultats obtenus avec le modèle sont assez proches de ceux obtenus avec la DNS, en particulier en ce qui concerne le comportement de l'équation

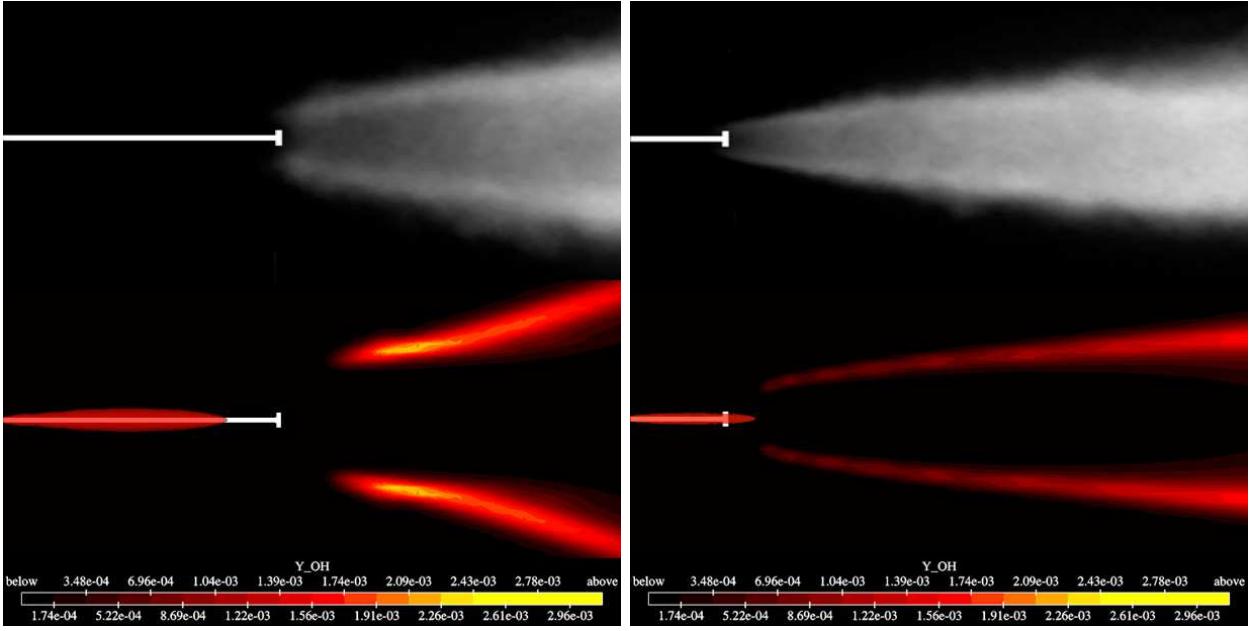


FIG. 6.23 – Comparaisons à $\rho_g = 14.8 \text{ kg.m}^{-3}$ (à gauche) et $\rho_g = 58.5 \text{ kg.m}^{-3}$ (à droite) entre les calculs obtenus avec le modèle *ELSA* couplé avec le modèle de combustion ECFM-3Z et les mesures expérimentales obtenues par chimiluminescence OH - l'indicateur blanc correspond à la distance de *lift-off* mesurée expérimentalement - le spray liquide est représenté à l'aide de l'iso-surface rouge où $\tilde{Y}_l = 0.01$

de transport de la densité massique moyenne d'interface liquide/gaz. Initialement, cette équation est postulée et de fortes similitudes de comportement entre le calcul *RANS* et la DNS ont été observées.

En seconde partie d'étude, plusieurs calculs *a priori* ont été effectués dans le but de tester différents paramètres influençant le modèle dans le cadre de l'injection de type Diesel : le choix des conditions limites d'entrée de jet (niveau de turbulence, échelle intégrale turbulente), l'influence de la méthode de couplage hybride Euler - Lagrange sur le développement du spray dans la chambre, l'impact du phénomène physique de rupture secondaire sur des sprays Diesel haute vitesse ou encore le niveau de convergence en espace (effet du raffinement de maillage).

Ensuite, une validation du modèle a été proposée pour des sprays Diesel en vaporisation, à l'aide d'une base de données fournie en interne. Elle a permis de valider l'aspect modélisation des échanges thermique et massique du modèle *ELSA* en comparant les pénétrations liquide et vapeur obtenues numériquement avec celles mesurées en expérience.

Enfin, une dernière partie concernant la modélisation de sprays Diesel en combustion a été présentée. Les calculs ont été effectués en couplage avec le modèle de combustion ECFM-3Z. Des calculs *a priori* ont tout d'abord été exposés concernant l'influence de la taille du trou de l'injecteur sur la combustion dans la chambre, montrant comment le modèle peut être utilisé pour étudier la physique de l'injection jusqu'à la combustion. Ensuite, un cas de validation a été présenté, basé sur des données expérimentales sur le positionnement de la flamme en régime stationnaire d'injection, en fonction des

conditions thermodynamiques dans la chambre.

Toutes ces validations ont été effectuées avec le modèle *ELSA* tel qu'il a été présenté aux chapitres 3, 4 et 5. L'ensemble des résultats montre un comportement du modèle généralement satisfaisant, permettant de faire le lien entre la géométrie de l'injecteur et la physique de l'atomisation et de l'évaporation, le mélange et la combustion qui en découlent étant modélisés par un modèle de combustion standard.

Conclusion générale et perspectives

Contexte et objectif de l'étude

Les contraintes environnementales de plus en plus sévères nous poussent à optimiser en permanence les machines utilisant des énergies fossiles : les moteurs de nos véhicules n'y échappent pas. Les voies d'amélioration de la combustion dans les moteurs sont nombreuses et, parmi celles existantes, l'optimisation de l'injection du carburant dans la chambre de combustion est progressivement devenue une composante essentielle au cours des dix dernières années.

La thématique centrale de ce travail est la modélisation de l'injection haute pression de type Diesel. L'objectif principal de l'étude consistait à développer théoriquement un modèle d'atomisation de l'injection haute pression de type Diesel, d'y intégrer la modélisation des échanges thermique et massique et d'implémenter l'ensemble dans le logiciel de *CFD* utilisé par PSA Peugeot Citroën, afin de le rendre compatible avec les modèles de combustion déjà disponibles dans le code de calcul.

Contributions

Dans le premier chapitre de ce manuscrit, les principaux nombres adimensionnels nécessaires à la caractérisation d'un spray ou d'une goutte liquide isolée sont introduits. Un résumé des connaissances phénoménologiques du spray est également proposé, en se basant sur des observations expérimentales et numériques. A l'heure actuelle, peu de modèles peuvent prendre en compte les phénomènes physiques liés à la zone primaire et à l'injecteur, qui régissent le processus d'atomisation. Il apparaît primordial d'intégrer dans un modèle de spray les effets de la géométrie de l'injecteur (phénomène de cavitation et niveau de turbulence en sortie d'injecteur) et des contraintes turbulentes importantes qui existent en zone proche de la buse, mais aussi le fait que le spray liquide n'est pas uniquement un nuage de gouttes (présence d'un dard liquide).

Le second chapitre présente les différentes approches possibles pour la résolution de l'équation d'évolution de la fonction densité de probabilité (ou équation de Williams). Les similitudes et les différences entre les approches eulérienne et lagrangienne sont également présentées. Les lois de comportement de type "goutte" sont décrites en détails. Une attention particulière est portée à la modélisation des échanges thermique et massique existant entre les phases liquide et gaz ainsi qu'aux

modèles lagrangiens de fractionnement primaire et secondaire afin de faire un état des lieux des différentes limitations liées à leur utilisation. Cela permet de dresser les grandes lignes de développement d'un modèle de spray qui soit capable de prendre en compte les effets de l'écoulement interne à l'injecteur et de la présence d'une zone dense de liquide sur le processus d'atomisation et d'évaporation du carburant.

Le troisième chapitre constitue la réponse aux constatations faites aux chapitres précédents. Le modèle *ELSA*, développé durant cette étude, est un modèle d'atomisation permettant une description du jet Diesel depuis l'intérieur de l'injecteur jusqu'en zone diluée. Il prend en compte la présence d'une zone continue de liquide en sortie de buse et traite le phénomène d'atomisation de façon originale en considérant les phases liquide et gaz comme un mélange à densité fortement variable. Une équation de transport pour la fraction massique de liquide est nécessaire pour la modélisation de la dispersion du liquide dans la chambre de combustion. Un terme non fermé apparaît et sa modélisation est discutée au chapitre 5. Une notion plus générale que le diamètre des gouttes est introduite : la densité massique d'interface liquide/gaz, permettant de s'affranchir d'une forme présumée (sphère) des paquets liquides issus de l'atomisation. L'équation de transport de cette grandeur est une équation phénoménologique, chaque terme source caractérisant un phénomène physique agissant sur la quantité d'aire interfaciale. Son écriture est discutée au chapitre 4. La modélisation des échanges thermique et massique entre les phases liquide et gaz est également décrite dans ce chapitre.

Une fermeture phénoménologique de l'équation de transport de la densité moyenne d'interface liquide/gaz par unité de masse est proposée dans le quatrième chapitre. Elle représente en fait une synthèse des travaux de Vallet *et al.* [79, 80], Iyer *et al.* [39, 40, 41] et Beau *et al.* [84, 85] (présentés en première partie de chapitre). Une distinction entre des fermetures avec et sans hypothèse de phase dispersée est introduite, pour ainsi tirer au mieux parti de chacune des approches disponibles dans la littérature. L'équation de transport proposée dans cette étude prend en compte la majorité des phénomènes physiques que subit un jet liquide lorsqu'il s'atomise : étirement et plissement turbulent, collisions et coalescences, rupture secondaire sous l'effet du différentiel de vitesse liquide/gaz et enfin vaporisation du liquide.

Une nouvelle approche pour la fermeture des flux turbulents intervenant dans les équations de transport de la fraction massique moyenne de liquide et de la densité massique moyenne d'interface liquide/gaz est proposée dans le cinquième chapitre. Elle se base sur une utilisation couplée des approches eulérienne et lagrangienne en zone diluée du jet. Cette méthode s'inscrit dans une suite logique de ce qui a été proposé précédemment pour la fermeture du flux turbulent de liquide (Bailly *et al.* [106] puis Beau *et al.* [84, 85]), en intégrant le phénomène physique de glissement entre phases, jusqu'à présent absent lorsqu'une loi gradient est utilisée pour fermer le terme de flux turbulent. De plus, cette hybridation Euler - Lagrange permet d'aller un peu plus loin en introduisant autant que possible une distribution de taille de gouttes plutôt qu'un diamètre moyen de Sauter par cellule du domaine de calcul.

Le dernier chapitre présente les différentes études menées en vue d'une validation du modèle *ELSA* et de son implémentation dans le code de *CFD* de PSA Peugeot Citroën.

La première partie de l'étude concerne la validation du modèle en zone dense, près de la buse d'injection, grâce à des comparaisons quantitatives avec une DNS de spray fournie par Ménard *et al.* [21]. Les résultats obtenus avec le modèle sont assez proches de ceux obtenus avec la DNS, en particulier en ce qui concerne le comportement de l'équation de transport de la densité massique moyenne d'interface liquide/gaz. Initialement, cette équation est postulée et de fortes similitudes de comportement entre le calcul *RANS* et la DNS ont été observées.

En seconde partie d'étude, plusieurs calculs *a priori* ont été effectués et permettent de s'affranchir de certaines incertitudes concernant les conditions limites ou le niveau de convergence spatial atteint avec les maillages utilisés. Une influence peu significative du phénomène de rupture secondaire des gouttes est également mise en évidence à l'utilisation du modèle *ELSA* dans le cas de sprays Diesel. Enfin, pour des injections à très haute vitesse de type Diesel, la méthode d'hybridation Euler - Lagrange présentée au chapitre 5 n'a que peu d'influence sur le spray formé. Il semble que dans des conditions d'injection à très grande vitesse, le phénomène de traînée soit négligeable devant le mouvement convectif moyen. Ensuite, une validation du modèle est proposée pour des sprays Diesel en vaporisation, à l'aide d'une base de données fournie en interne. Elle permet de valider l'aspect modélisation des échanges thermique et massique du modèle *ELSA* en comparant les pénétrations liquide et vapeur obtenues numériquement avec celles mesurées en expérience.

Enfin, une dernière partie concernant la modélisation de sprays Diesel en combustion est présentée. Les calculs ont été effectués en couplage avec le modèle de combustion ECFM-3Z. Des calculs *a priori* sont tout d'abord exposés concernant l'influence de la taille du trou de l'injecteur sur la combustion dans la chambre. Ensuite, un cas de validation est présenté, basé sur des données expérimentales sur le positionnement de la flamme en régime stationnaire d'injection, en fonction des conditions thermodynamiques dans la chambre.

Toutes ces validations ont été effectuées avec le modèle *ELSA* tel qu'il a été présenté aux chapitres 3, 4 et 5. L'ensemble des résultats montre un comportement du modèle encourageant, permettant de faire le lien entre la géométrie de l'injecteur et la physique de l'atomisation et de l'évaporation, le mélange et la combustion qui en découlent étant modélisés par un modèle de combustion tiers.

Perspectives

A la vue des résultats obtenus, il convient de proposer des voies d'amélioration au modèle développé durant cette étude.

Dans des conditions d'injection à très grande vitesse, la méthode d'hybridation Euler - Lagrange n'a pas d'influence significative sur le spray formé. Cependant, le couplage n'est présent qu'au niveau des flux turbulents. D'une manière générale, tout modèle eulérien a son pendant lagrangien. Il serait donc envisageable d'établir un couplage entre les formalismes eulérien et lagrangien au niveau d'autres termes comme le taux de vaporisation, le flux de chaleur entre phases liquide et gaz ou au niveau des sous-modèles d'atomisation secondaire et de collisions/coalescences. De plus, utiliser l'approche

lagrangienne que proposent les logiciels de *CFD* permettrait aussi à l'avenir de s'affranchir de certaines difficultés liées à l'impact des jets aux parois du piston ou aux interactions fortes entre jets. En effet, des modèles de collisions spécifiques à ce type de problèmes existent déjà dans la littérature et pourraient être intégrés dans le modèle *ELSA* par le biais de telles approches de couplage Euler - Lagrange.

Ensuite, lors des comparaisons avec les résultats issus de calculs DNS, un problème de modélisation de la turbulence diphasique a été mis en évidence. Il serait intéressant d'adapter les équations de transport de l'énergie cinétique turbulente et de la dissipation turbulente à la description d'un écoulement diphasique. Une voie possible serait de séparer la partie liée aux fluctuations turbulentes de l'énergie cinétique turbulente et de la dissipation, de la partie liée au carré de la vitesse moyenne de glissement entre les deux phases liquide et gaz.

Enfin, une voie prometteuse serait l'intégration du modèle *ELSA* dans un solveur basé sur un formalisme LES. Cette approche ne nécessite pas de modélisation aux grandes échelles et reporterait donc le problème du traitement de la turbulence diphasique à l'échelle de sous-maille. Ce problème reste cependant difficile à appréhender car l'effet de tension de surface au niveaux des petites échelles de l'écoulement n'est pas évident à prendre en compte. Une intervention au niveau des modèles de fermeture de sous-maille serait probablement nécessaire.

Bibliographie

- [1] R. D. Reitz and F. V. Bracco. Mechanisms of breakup of round liquid jets. *The Encyclopedia of Fluid Mechanics*, N. Cheremisnoff, Ed. Gulf Publishing, New Jersey, 3(Chapter 10) :233–249, 1986.
- [2] A. Fath, C. Fettes, and A. Leipertz. Investigation of the diesel spray breakup close to the nozzle at different injection conditions. *Comodia Symposium*, pages 429–434, 1997.
- [3] C. T. Chang and P. V. Farrell. Spray characteristics and near injector tip effects of injection pressure and ambient density. *Comodia Symposium*, page 1973, 1998.
- [4] E. M. El-Hannouny, S. Gupta, C. F. Powell, S.-K. Cheong, and J. Wang. Time resolved x-ray measurements of diesel sprays at elevated back pressure. *ILASS (Americas) Papers*, 2005.
- [5] Y. Yue, C. F. Powell, R. Poola, J. Wang, and J. K. Schaller. Quantitative measurements of diesel fuel spray characteristics in the near-nozzle region using x-ray absorption. *Atomization and Sprays*, 11 :471–490, 2001.
- [6] F. X. Tanner, K. A. Feigl, S. A. Ciatti, C. F. Powell, S. K. Cheong, J. Liu, and J. Wang. Structure of high-velocity dense sprays in the near-nozzle region. *Atomization and Sprays*, 16 :579–597, 2006.
- [7] L. Méès, C. Calba, A. Bonnamy, C. Rozé, T. Girasole, and J.-B. Blaisot. Femtosecond time scaled diagnostics in dense scattering media. *8th International Congress on Optical Particle Characterization*, 2007.
- [8] H. Chaves, C. Kirmse, and F. Obermeier. Velocity measurements of dense diesel fuel sprays in dense air. *Atomization and Sprays*, 14 :589–609, 2004.
- [9] W. Cai. Quantitative analysis of highly transient fuel sprays by time-resolved x-radiography. *Applied Physics Letters*, 83 :1671–1673, 2003.
- [10] R. D. Reitz. Modelling atomization process in high-pressure vaporizing sprays. *Atomization and Spray Technology*, 3(309-337), 1987.
- [11] K. Y. Huh and A. D. Gosman. A phenomenological model of diesel spray atomization. *Proceeding of the International Conference on Multiphase Flows, Tsukuba*, 1991.
- [12] M. Stahl, M. Gnirs, N. Damaschke, and C. Tropea. Laser doppler measurement of nozzle flow and optical characterisation of the generated spray. *ILASS (Europe) Papers*, 2005.

- [13] M. Stahl, N. Damaschke, and C. Tropea. Experimental investigation of turbulence and cavitation inside a pressure atomizer and optical characterization of the generated spray. *ICLASS Papers, Kyoto*, 2006.
- [14] R. Saliba, M. Gaud, and J. C. Champoussin. Influence de la géométrie de l'orifice sur la cavitation et la morphologie du spray en injection diesel. *Colloque FLUVISU11*, 2005.
- [15] R. Saliba and J. C. Champoussin. Influence of the nozzle geometry on the cavitation and on the spray development in diesel injection. *ILASS (Europe) Papers*, 2005.
- [16] R. D. Reitz and F. V. Bracco. Mechanism of atomization of a liquid jet. *Physics of Fluids*, 25(10) :1730–1742, 1982.
- [17] C. W. Hirt and B. D. Nichols. Volume of fluid methods for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics*, 30 :201–255, 1981.
- [18] M. Sussman, E. Fatemi, P. Smereka, and S. Osher. Improved level set method for incompressible two-phase flows. *Computers and Fluids*, 27 :663–680, 1998.
- [19] S. O. Unverdi and G. Tryggvason. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *Journal of Computational Physics*, 99 :180, 1992.
- [20] S. Zaleski. Direct simulation of spray formation. *ICLASS Papers, Seoul*, 1997.
- [21] T. Ménard, S. Tanguy, and A. Berlemont. Coupling level set / vof / ghost fluid methods : Validation coupling level set / vof / ghost fluid methods : Validation and application to 3d simulation of jet primary break-up. *International Journal of Multiphase Flow*, in press.
- [22] L. Lambert. Etude bibliographique sur les jets diesel. *Institut Français du Pétrole*, 26(177), 1993.
- [23] R. D. Reitz. *Atomization and other break-up regimes of a liquid jet*. PhD thesis, Princeton University, 1978.
- [24] S. Leroux. *Stabilité d'un jet cylindrique - influence des fortes pressions ambiantes*. PhD thesis, Université de Rouen, 1996.
- [25] G. M. Faeth. Structure and atomization properties of dense turbulent sprays. *Proceeding of the Combustion Institute*, pages 1345–1352, 1990.
- [26] J. W. S. Rayleigh. On the stability of jets. *Proc. of the Lond. Math. Soc.*, 10 :4–13, 1878.
- [27] J. Plateau. *Statique Expérimentale et Théorique des Liquides Soumis aux Seules Forces Moléculaires*. Gaitier-Villars, 1873.
- [28] C. Weber. Zum zerfall eines flüssigkeitsstrahles. *Z. Angew. Math. Mech.*, 11 :136–141, 1931.
- [29] V. G. Levich. *Physicochemical Hydrodynamics*. Prentice-Hall, 1962.
- [30] J. W. S. Rayleigh. *The Theory of Sound*. Dover Pub N. Y., 1945.
- [31] M. J. McCarthy and N. A. Molloy. Review of stability of liquid jets and the influence of nozzle design. *The Chemical Engineering Journal*, 7 :1–20, 1974.

- [32] P. Marmottant. *Atomisation d'un liquide par un courant gazeux*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Grenoble, 2001.
- [33] F. Williams. Spray combustion and atomization. *Physics of Fluids*, 1 :541–545, 1958.
- [34] D. B. Spalding. Combustion of fuel particles. *Fuel* 30, 121, 1951.
- [35] D. B. Spalding. Theory of particle combustion at high pressure. *ARS J.* 29, 828–35, 1959.
- [36] O. Simonin. Continuum modelling of dispersed turbulent two phase flows, combustion and turbulence in two phase flows. *VKI Lecture Series*, 2000.
- [37] Y. P. Wan and N. Peters. Scaling of spray penetration with evaporation. *Atomization and Sprays*, 9 :111–132, 1999.
- [38] J. Soulas. *Modélisation et Simulation de la Pulvérisation d'un Jet Liquide - Application à l'Injection Directe Essence*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2002.
- [39] V. A. Iyer and J. Abraham. Modelling of diesel sprays using an eulerian liquid eulerian gas two-fluid model. *ASME*, 2001.
- [40] V. A. Iyer, J. Abraham, and V. Magi. Exploring injected droplet size effects on steady liquid penetration in a diesel spray with a two-fluid model. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 45 :519–531, 2002.
- [41] V. A. Iyer and J. Abraham. An evaluation of a two-fluid eulerian liquid eulerian gas model for diesel sprays. *Journal of Fluids Engineering*, 125 :660–669, 2003.
- [42] Y. Tambour. Vaporization of polydisperse fuel sprays in a laminar boundary layer flow : A sectional approach. *Combustion and Flame*, 58 :103–114, 1984.
- [43] J. B. Greenberg, I. Silverman, and Y. Tambour. On the origins of spray sectional conservation equations. *Combustion and Flame*, 93 :90–96, 1993.
- [44] F. Laurent and M. Massot. Multi-fluid modeling of laminar polydisperse spray flames : origin, assumptions and comparisons of sectional and sampling methods. *Combustion, Theory and Modelling*, 5 :537–572, 2001.
- [45] F. Laurent, M. Massot, and P. Villedieu. Eulerian multi-fluid modeling for the numerical simulation of polydisperse dense liquid sprays. *Journal of Computational Physics*, 194(2) :505–543, 2004.
- [46] Marcel Divis, Jan Macek, and Karel Kozel. Eulerian multidimensional model for computing the fuel sprays. *SAE Technical Paper Series*, (2004-01-0537), 2004.
- [47] Marcel Divis and Jan Macek. Fuel injection process computations using the eulerian multidimensional model. *SAE Technical Paper Series*, (2005-01-1243), 2005.
- [48] O. Souldard and V. Sabel'nikov. Eulerian monte carlo method for the joint velocity and mass-fraction probability density function in turbulent reactive gas flows. *Combustion, Explosion and Shock Waves*, 42(6) :753–762, 2006.

- [49] J. C. Beck and A. P. Watkins. On the development of spray submodels based on droplet size moments. *Journal of Computational Physics*, 182 :586–621, 2002.
- [50] J. C. Beck and A. P. Watkins. The droplet number moments approach to spray modelling : the development of heat and mass transfer sub-models. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 24 :242–259, 2003.
- [51] J. C. Beck and A. P. Watkins. Simulation of water and other non-fuel sprays using a new spray model. *Journal of the International Institutions for Liquid Atomization and Spray Systems*, 13 :1–26, 2003.
- [52] J. C. Beck and A. P. Watkins. The simulation of fuel sprays using the moments of the drop number size distribution. *International Journal of Engine Research*, 5 :1–21, 2004.
- [53] D. L. Marchisio, R. D. Vigil, and R. Fox. Implementation of the quadrature method of moments in cfd codes for aggregation-breakage problems. *Chemical Engineering Science*, 58 :3337–3351, 2003.
- [54] D. L. Marchisio, R. D. Vigil, and R. Fox. Quadrature method of moments for aggregation-breakage processes. *Journal of Colloid and Interface Science*, 258 :322–334, 2003.
- [55] D. L. Marchisio and R. Fox. Solution of population balance equations using the direct quadrature method of moments. *Journal of Aerosol Science*, 36 :43–73, 2005.
- [56] A. Zucca, D. L. Marchisio, A. Barresi, and R. Fox. Implementation of the population balance equation in cfd codes for modelling soot formation in turbulent flames. *Chemical Engineering Science*, Article in Press.
- [57] R. Fan, D. L. Marchisio, and R. Fox. Application of the direct quadrature method of moments to polydisperse gas-solid fluidized beds. *Powder Technology*, 139 :7–20, 2004.
- [58] R. Fox. Direct quadrature method of moment. *Computational Models for Turbulent Reacting Flows*, Appendix B :372–386, 2004.
- [59] M. Pourouchottamane, V. Burnley, F. Dupoirieux, M. Habiballah, and L. Vingert. Numerical analysis of the 10 bar mascotte flow field. *2nd International Workshop on Rocket Combustion Modeling - 26-27 mars 2001, Heilbronn, Allemagne*.
- [60] L. Schiller and Z. Naumann. A drag coefficient correlation. *Z. Ver. Deutsch. Ing.*, 77(318), 1935.
- [61] B. Abramzon and W. A. Sirignano. Droplet vaporization model for spray combustion calculations. *Journal of Heat and Mass Transfer*, 32(9) :1605–1618, 1989.
- [62] B. A. Abramzon and W. A. Sirignano. Approximate theory of a single droplet vaporization in a convective field : effects of variable properties, stefan flow and transient liquid heating. *Proceeding 2nd ASME-JSME Thermal Engineering Joint Conference Honolulu Hawaii*, 1 :11–18, March 1987.
- [63] J. K. Dukowicz. A particle-fluid numerical model for liquid sprays. *Journal of Computational Physics*, 35 :229–253, 1980.

- [64] A. A. Amsden, P. J. O'Rourke, and T. D. Butler. Kiva-ii : A computer program for chemically reactive flows with sprays. *LA-11560-MS Los Alamos Laboratory*, 1989.
- [65] M. C. Yuen and L. W. Chen. On drag of evaporating liquid droplets. *Combustion Science and Technology*, 14 :147–154, 1976.
- [66] R. B. Bird, W. E. Stewart, and E. N. Lightfoot. *Transport Phenomena*. Wiley, New York, 1960.
- [67] D. A. Frank-Kamenetskii. *Diffusion and Heat Transfer in Chemical Kinetics (2nd Edn)*. Plenum Press, New York, 1969.
- [68] R. Clift, J. R. Grace, and M. E. Weber. *Bubbles, Drops and Particles*. Academic Press, New York, 1978.
- [69] M. M. Elkotb. Fuel atomization for spray modelling. *Progress in Energy and Combustion Science*, 8 :61–91, 1982.
- [70] H. Hiroyasu, M. Arai, and M. Tabati. Empirical equations for the sauter mean diameter of a diesel spray. *SAE Technical Paper Series*, (890464), 1989.
- [71] M. A. Patterson and R. D. Reitz. Modelling the effects of fuel spray characteristics on diesel engine combustion and emission. *SAE Technical Paper Series*, (980131), 1998.
- [72] K. Y. Huh, E. Lee, and J. Y. Koo. Diesel spray atomization model considering nozzle exit turbulence conditions. *Atomization and Sprays*, 8 :453–469, 1998.
- [73] R. D. Reitz and R. Diwakar. Effect of drop breakup on fuel sprays. *SAE Technical Paper Series*, (860469), 1986.
- [74] R. D. Reitz and R. Diwakar. Structure of high-pressure fuel sprays. *SAE Technical Paper Series*, (870598), 1987.
- [75] J. Nicholls. Stream and droplet breakup by shock waves. *NASA SP-194*, Eds. D. T. Harrje and F. H. Reardon, pages 126–128, 1972.
- [76] P. J. O'Rourke and A. A. Amsden. The tab method for numerical calculation of spray droplet breakup. *SAE Technical Paper Series*, (872089), 1987.
- [77] M. Pilch and C. A. Erdman. Use of breakup time data and velocity history data to predict the maximum size of stable fragments for acceleration-induced breakup of a liquid drop. *International Journal of Multiphase Flow*, 13 :741–757, 1987.
- [78] C. Habchi, D. Verhoeven, C. Huynh Huu, L. Lambert, J. L. Vanhemelryck, and T. Baritaud. Modeling atomization and break-up in high-pressure diesel sprays. *SAE Technical Paper Series*, (970881), 1997.
- [79] A. Vallet. *Contribution à la Modélisation de l'Atomisation d'un Jet Liquide Haute Pression*. PhD thesis, Université de Rouen, 1997.
- [80] A. Vallet, A. A. Burluka, and R. Borghi. Development of a eulerian model for the atomization of a liquid jet. *Atomization and Sprays*, 11 :619–642, 2001.

- [81] G. Blokkeel. *Modélisation Eulérienne du Suivi et du Fractionnement d'un Jet Liquide Injecté à Grande Vitesse*. PhD thesis, Université de la Méditerranée Aix-Marseille II, 2003.
- [82] G. Blokkeel, B. Barbeau, and R. Borghi. A 3d eulerian model to improve the primary break-up of atomizing jet. *SAE Technical Paper Series*, (2003-01-005), 2003.
- [83] P.-A. Beau, M. Funk, R. Lebas, and F.-X. Demoulin. Applying quasi-multiphase model to simulate atomization processes in diesel engines : Modeling of the slip velocity. *SAE Technical Paper Series*, (2005-01-0220), 2005.
- [84] P.-A. Beau. *Modélisation de l'atomisation d'un jet liquide - Applications aux sprays Diesel*. PhD thesis, Université de Rouen, 2006.
- [85] P.-A. Beau, T. Ménard, R. Lebas, A. Berlemont, and F.-X. Demoulin. Primary break up modeling - part b : Extracting modeling information from dns based results. *ICLASS Papers, Kyoto*, 2006.
- [86] T. Ménard, P.-A. Beau, S. Tanguy, F.-X. Demoulin, and A. Berlemont. Primary break up modeling - part a : Dns, a tool to explore primary break up. *ICLASS Papers, Kyoto*, 2006.
- [87] W. P. Jones and B. E. Launder. The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 15(2) :301–314, 1972.
- [88] F.-X. Demoulin, P.-A. Beau, G. Blokkeel, A. Mura, and R. Borghi. Modelling of liquid atomization as flow with high density fluctuations. *Atomization and Sprays*, In Press, 2006.
- [89] D. Stepowski and O. Werquin. Measurement of the liquid volume fraction and its statistical distribution in the near development field of a spray. *Atomization and Sprays*, 14 :3–25, 2004.
- [90] F. E. Marble and J. E. Broadwell. The coherent flame model for turbulent chemical reactions. Technical Report TRW-9-PV, Chaffee Hall, Purdue University, West Lafayette, 1977.
- [91] S. Tanguy. *Développement d'une méthode de suivi d'interface. Applications aux écoulements diphasiques*. PhD thesis, Université de Rouen, 2004.
- [92] S. V. Patankar and D. B. Spalding. A calculation procedure for heat, mass and momentum a calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 15 :1787–1806, 1972.
- [93] K. C. Karki and S. V. Patankar. Pressure-based calculation procedure for viscous flows at all speeds in arbitrary configurations. *AIAA Journal*, 27 :1167–1174, 1989.
- [94] I. Demirdzic, Z. Lilek, and M. Peric. A collocated finite volume method for predicting flows at all speeds. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 16 :1029–1050, 1993.
- [95] S. V. Patankar. *Numerical heat transfer and fluid flow*. McGraw Hill, London, 1980.
- [96] M. Ishii. *Thermo-fluid dynamic theory of two-phase flow*. Eyrolles, 1975.
- [97] M. Ishii. *Thermo-fluid dynamic theory of two-phase flow*. Springer, 2006.
- [98] S. M. Candel and T. Poinso. Flame stretch and the balance equation for the flame area. *Combustion Science and Technology*, 70 :1–15, 1990.

- [99] J. M. Duclos, D. Veynante, and T. Poinso. A comparison of flamelet models for premixed turbulent combustion. *Combustion and Flame*, 95 :101–117, 1993.
- [100] P. J. O'Rourke and F. V. Bracco. Modelling of drop interactions in thick sprays and a comparison with experiments. *The Institution of mechanical engineers*, (Publication 1980-9), 1980.
- [101] D. Gidaspow. *Multiphase flow and fluidization : continuum and kinetic theory description*. McGraw-Hill, 1984.
- [102] P. J. O'Rourke. *Collective drop effects on vaporizing liquid sprays*. PhD thesis, University of Princeton, 1981.
- [103] S. Jay, F. Lacas, and S. Candel. Combined surface density for dense spray combustion. *Combustion and Flame*, 144 :558–577, 2005.
- [104] J. Qian and C. K. Law. Regimes of coalescence and separation of droplet collision. *Journal of Fluid Mechanics*, 331 :59–80, 1997.
- [105] A. A. Burluka and R. Borghi. Stretch effects on the vaporization rate in fendell's problem. *Combustion and Flame*, 122 :227–232, 2000.
- [106] P. Bailly, M. Champion, and D. Garréon. Counter gradient diffusion in a confined turbulent premixed flame. *Physics of Fluids*, 9(3) :766–775, 1987.
- [107] D. A. Drew. Mathematical modelling of two-phase flow. *Annual review of fluid mechanics*, 15 :261–291, 1983.
- [108] S. Tanguy and A. Berlemont. Application of a level set method for simulation of droplet collisions. *International Journal of Multiphase Flow*, 31(9) :1015–1035, 2005.
- [109] R. Fedkiw, T. Aslam, B. Merriman, and S. Osher. A monoscillatory eulerian approach to interfaces in multimaterial flows (the ghost fluid method). *Journal of Computational Physics*, 152 :457–492, 1999.
- [110] M. Sussman and E. G. Puckett. A coupled level set and volume of fluid method for computing 3d and axisymmetric incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 162 :301–337, 2000.
- [111] M. Klein and A. Sadiki. A digital filter based generation of inflow data for spatially developping direct numerical or large eddy simulation. *Journal of Computational Physics*, 186 :652–665, 2003.
- [112] O. Colin and A. Benkenida. The 3-zones extended coherent flame model (ecfm-3z) for computing premixed/diffusion combustion. *Oil and Gas Science and Technology*, 59(6) :593–609, 2004.
- [113] B. F. Magnussen and B. H. Hjertager. On mathematical modeling of turbulent combustion with emphasis on soot formation and combustion. *16th International Symposium on Combustion, Pittsburgh : The Combustion Institute*, 1977.
- [114] B. S. Higgins and D. L. Siebers. Measurement of the flame lift-off location on di diesel sprays using oh chemiluminescence. *SAE Technical Paper Series*, (2001-01-0918), 2001.

Résumé :

Les contraintes actuelles, écologiques et économiques, imposent aux constructeurs automobiles de réduire la consommation et les émissions polluantes des moteurs Diesel. Pour améliorer ces derniers, il faut comprendre finement les phénomènes physiques mis en jeu et en particulier l'injection du carburant dans la chambre de combustion. Une voie d'analyse de la physique et d'optimisation des moteurs Diesel à injection directe est la simulation numérique et plus particulièrement la modélisation. Après avoir détaillé les caractéristiques physiques des sprays, les modélisations existantes du processus d'atomisation ainsi que leurs limitations, un modèle innovant est présenté : le modèle *ELSA* (pour *Euler - Lagrange pour les Sprays et l'Atomisation*). Il prend en compte l'écoulement dans la zone dense du spray et traite le phénomène d'atomisation depuis l'intérieur de l'injecteur jusque dans la zone diluée du spray. Les équations fondamentales de ce modèle sont l'équation de transport de la fraction massique moyenne de liquide et l'équation de transport de la densité massique moyenne d'interface liquide/gaz. Dans ces deux équations apparaît un terme de flux turbulent non fermé. Une méthode de couplage des formalismes eulérien et lagrangien est proposée pour sa fermeture. De plus, en prenant en compte chacun des phénomènes physiques agissant sur la quantité d'aire interfaciale liquide/gaz, des évolutions sur la fermeture de cette équation de transport sont apportées. Enfin, les échanges thermique et massique entre les phases liquide et gaz sont intégrés au modèle *ELSA* à l'aide de deux équations de transport : une pour la fraction massique de vapeur et une pour l'enthalpie massique de la phase liquide. Des cas de validations sont présentés, concernant tout d'abord une étude comparative en zone dense du jet avec des données issues d'une simulation numérique directe puis à l'aide de données expérimentales macroscopiques comme les pénétrations liquide et vapeur pour un spray vaporisant ou le positionnement de flamme dans le cas d'une combustion diphasique en régime stationnaire.

Abstract :

Nowadays, environmental and economic constraints force the car manufacturers to reduce the consumption and the pollutant emissions of Diesel engines. To improve these engines, it is necessary to precisely understand the physical phenomena that occur in the combustion chamber and more specifically the injection process. A way of analysis and optimization is the numerical simulation and the modeling. After having detailed the physical characteristics of the sprays, the existing models for the atomization process and their limitations, an innovating model is presented : the *ELSA* model (for *Eulerian - Lagrangian Spray Atomization*). It takes into account the flow in the dense zone of the spray and deals with the atomization phenomenon from inside the injector to the dilute part of the spray. Two main physical properties are evaluated thanks to transport equations : the mean liquid mass fraction and the mean liquid/gas interface density per unit of mass. In both equations, a turbulent flux term is unclosed. A coupling method between eulerian and lagrangian formalisms is proposed in order to close this term. Moreover, taking into account the physical phenomena that influence the liquid/gas interface density, a transport equation for this quantity is presented. Finally, heat and mass transfers are taken into account and integrated in the *ELSA* model, thanks to transport equations for the mean vapour mass fraction and the mean liquid enthalpy per unit of mass. Validation cases are presented as comparative studies : in the dense zone of the spray thanks to data obtained via a direct numerical simulation and as a more macroscopic point of view thanks to liquid and vapour penetrations in Diesel conditions or lift-off distances in a case of steady state combustion of a liquid spray.