



HAL
open science

Simulation numérique directe des écoulements liquide-gaz avec évaporation : application à l'atomisation

Benjamin Duret

► **To cite this version:**

Benjamin Duret. Simulation numérique directe des écoulements liquide-gaz avec évaporation : application à l'atomisation. Thermique [physics.class-ph]. INSA de Rouen, 2013. Français. NNT : 2013ISAM0031 . tel-00971810

HAL Id: tel-00971810

<https://theses.hal.science/tel-00971810>

Submitted on 3 Apr 2014

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE

présentée par

BENJAMIN DURET

Pour l'obtention du grade de

Docteur de l'INSA de Rouen

Discipline : Physique
Spécialité : Energétique
Formation doctorale : Sciences Physiques, Mathématiques
et de l'Information pour l'Ingénieur.
Laboratoire d'accueil : CNRS UMR6614-CORIA

Simulation numérique directe des écoulements liquide-gaz avec évaporation : application à l'atomisation

Soutenue le 17 octobre 2013

Membres du jury

Rapporteurs :

Jean-Luc Estivalezes
Mikhael Gorokhovski

Professeur associé, INP Toulouse
Professeur, Ecole Centrale de Lyon

Examineurs :

François-Xavier Demoulin
David Le Touzé
Marc Massot
Julien Réveillon
Sébastien Tanguy

Maître de conférence, Université de Rouen
Professeur, Ecole Centrale de Nantes
Professeur, Ecole Centrale de Paris
Professeur, Université de Rouen
Maître de conférence, Université de Toulouse

Membre invité :

Roland Borghi

Professeur, Université d'Aix-Marseille II

Remerciements

Je tiens à remercier tout particulièrement mes directeurs de thèse François-Xavier Demoulin et Julien Réveillon, qui m'ont toujours soutenu et apporté de précieux conseils tout au long de ma thèse.

Je remercie les membres du jury pour avoir accepté de rapporter et examiner cette thèse.

Je remercie également l'ensemble de la "ARCHER team", en particulier Thibault Ménard et Mathieu Doring, qui m'ont appris les joies du numérique : c'est à dire s'arracher les cheveux pendant des semaines sur un cas de validation qui refuse de fonctionner ! C'est un plaisir de travailler avec des gens aussi rigoureux.

Il m'est malheureusement impossible de citer la totalité des personnes qui m'ont aidé pendant mon séjour au CORIA, que ce soit au niveau administratif ou informatique. Mais sachez que sans votre aide les doctorants ne sont rien !

Je n'oublie pas non plus les fameuses pause cafés composées de doctorants particulièrement zélés qui refont le monde et révolutionnent la science. Je vous salue et souhaite bon courage à ceux qui s'approchent de la date de soutenance fatidique.

Je salue également ma famille et mes proches, qui m'ont apporté leur soutien dans les moments de doute.

Table des matières

Liste des symboles	9
Introduction	13
1 Contexte général et état de l'art	19
1.1 Processus d'atomisation	19
1.1.1 Importance du processus d'atomisation	19
1.1.2 Atomisation primaire ou Zone dense	20
1.1.3 Atomisation secondaire et zone diluée	21
1.1.4 Approches expérimentales	21
1.2 Simulation numérique et modélisation de l'atomisation primaire	22
1.2.1 Résolution directe des équations : formalisme DNS	23
1.2.1.a Description et Résolution de la turbulence	23
1.2.1.b Prise en compte d'une interface	25
1.2.2 Modélisation de l'atomisation primaire	28
1.3 Evaporation	30
1.3.1 Description du processus d'évaporation	30
1.3.2 Méthodes Lagrangiennes et modèles d'évaporation standard	32
1.3.3 Description fine de l'évaporation par simulation directe	33
1.3.3.a Définition de la DNS d'évaporation	33
1.3.3.b Etat de l'art	35
2 Validation et analyse d'un écoulement Turbulent Homogène Isotrope diphasique	37
2.1 Introduction	37
2.2 Equations résolues et Méthodes numériques	38
2.2.1 Equations résolues	38
2.2.1.a Equations de Navier-Stokes	38
2.2.1.b Suivi d'interface	39

2.2.1.c	Méthode de forçage	42
2.2.2	Configuration numérique	43
2.3	Validation monophasique	43
2.3.1	Forçage	44
2.3.2	Echelles de turbulence et dissipation	45
2.3.3	Comparaison entre deux codes DNS	49
2.3.4	Convergence en maillage	50
2.3.5	Conclusion	51
2.4	Analyse de la THI diphasique	52
2.4.1	Configuration	52
2.4.2	Comportement de l'interface	52
2.4.3	Influence du diphasique sur la turbulence	53
2.5	Conclusion et perspectives	57
3	Amélioration du modèle d'atomisation primaire ELSA à l'aide de la simulation numérique directe	59
3.1	Abstract	59
3.2	Introduction	60
3.3	Numerical methods	61
3.3.1	Navier-Stokes equation	61
3.3.2	Interface tracking method	63
3.3.3	Numerical configuration	64
3.4	Primary atomization modeling	65
3.4.1	ELSA model overview	65
3.5	Results and Discussion	67
3.5.1	Equilibrium Weber number We^*	67
3.5.1.a	Definition	67
3.5.1.b	Statistical analysis	68
3.5.1.c	Turbulent kinetic energy	70
3.5.2	Analysis of S_{turb}	71
3.5.2.a	Averaging procedure	71
3.5.2.b	Transient regime results	72
3.6	Conclusion	76
4	Modélisation de l'évaporation à l'aide d'un scalaire passif	79
4.1	Abstract	79
4.2	Introduction	80

4.3	Numerical considerations	83
4.3.1	Navier-Stokes and scalar equations	83
4.3.2	Interface tracking method	85
4.4	Numerical configuration	86
4.4.1	Parameters choice	86
4.4.2	Validation	86
4.4.2.a	Single Phase flows	87
4.4.2.b	Two-phase flows	88
4.4.3	Initializing phase	88
4.5	Discussion	89
4.5.1	Liquid/gas flow	89
4.5.1.a	Mixture fraction fluctuations	90
4.5.1.b	PDF evolution	94
4.5.1.c	PDF shapes	98
4.5.2	Energy spectra analysis	99
4.5.2.a	Velocity fields	99
4.5.2.b	Scalar fluctuations	103
4.6	Conclusion	105
5	Résolution directe de l'évaporation avec régression d'interface	109
5.1	Equations supplémentaires résolues	109
5.1.1	Enthalpie sensible	109
5.1.2	Fraction massique de vapeur	110
5.1.3	Conditions de saut et conditions limites associées	111
5.1.3.a	Thermodynamique	111
5.1.3.b	Dynamique	112
5.2	Méthodes numériques	113
5.2.1	Méthode Ghost Fluid	113
5.2.2	Extrapolation d'ordre élevée	116
5.2.3	Application d'une condition limite de dirichlet sur l'interface	118
5.2.4	Méthode de projection modifiée pour le saut de vitesse	120
5.2.5	Régression d'interface	122
5.3	Validation	122
5.3.1	Validation pour le saut de vitesse : vitesse de regression imposée	122
5.3.2	Validation de la thermodynamique : Loi du D^2	124
5.3.2.a	Hypothèses et théorie	125
5.3.2.b	Comparaison entre simulation et théorie	128

5.3.3	Evaporation d'une goutte déformée en mouvement	129
5.4	Conclusion et perspectives	132
	Conclusion finale et perspectives	135

Liste des symboles

Caractères latins

D	Tenseur des contraintes visqueuses
n	Vecteur normal unitaire
U	Vecteur vitesse
C_p	Capacité thermique
D^t	Coefficient de diffusivité thermique
D_m	Coefficient de diffusion de la vapeur
G	Fonction Level Set
H	Fonction d'Heaviside
h_{lv}	Chaleur latente d'évaporation
h_s	Enthalpie sensible
l_{int}	Echelle intégrale
M_i	Masse molaire de l'espèce i
P	Pression thermodynamique
p	Pression
p_{atm}	Pression atmosphérique
p_{vs}	Pression de vapeur saturante
R	Constante des gaz parfait
T	Température
U_{reac}	Vitesse de régression d'interface

Y_{vs}	Fraction massique de vapeur saturante
Y_v	Fraction massique de vapeur
Z	Fraction de mélange
k	Energie cinétique turbulente
U^*	Vitesse intermédiaire

Caractères grecs

δ	Fonction de Dirac
$\dot{\omega}_v$	Taux d'évaporation
η	Echelle de Kolmogorov
κ	Courbure
λ	Conductivité thermique
λ_t	Echelle de Taylor
μ	Viscosité dynamique
ν	Viscosité cinématique
ϕ	Fraction volumique de liquide
ρ	Masse volumique
σ	Tension de surface
τ_{ij}	Tenseur des contraintes
θ	Distance à l'interface
ε	Dissipation d'énergie cinétique turbulente
φ_l	Flux thermique liquide

Nombres sans dimensions

Oh	Nombre d'Ohnesorge
Re	Nombre de Reynolds
Re_{λ_t}	Nombre de Reynolds turbulent
We	Nombre de Weber

Abréviations

ACLS Accurate Conservative Level Set

CLSVOF Coupled Level Set/Volume Of Fluid method

DNS Direct Numerical Simulation

ELSA Eulerian Lagrangian model for Spray and Atomization

LES Large-Eddy Simulation

RANS Reynolds Averaged Navier-Stokes

RK Runge Kutta

RLSG Refined Level Set Grid method

VOF Volume Of Fluid

WENO Weighted Essentially Non-Oscillatory

Introduction

Les normes dédiées aux réductions d'émissions de polluants étant de plus en plus restrictives pour tout les types de moteurs à combustion, il est important de trouver des optimisations efficaces pour réduire au maximum ces émissions. Cependant, les multiples processus mis en jeu au sein de la chambre de combustion rendent cette tâche difficile (Voir Figure 1). On peut résumer les différents processus physiques de la manière suivante : l'atomisation va fractionner le liquide, qui va s'évaporer et se mélanger au sein de la chambre. Une fois le mélange suffisamment homogène, la combustion peut prendre place.

On dissocie généralement ces processus pour les étudier séparément, car une étude complète de ceux-ci est difficilement réalisable. Notons que le point de départ reste l'atomisation du carburant, et qu'une mauvaise prédiction de l'atomisation influence de façon notable l'évaporation et le mélange au sein de la chambre. En fonction de la répartition des structures liquides, la vapeur peut être libérée de façon inhomogène : présence de régions plus riches en vapeur que d'autres au sein de la chambre. Cela impacte directement la combustion et la production de polluants. Le spray idéal dans ce contexte est un spray composé d'une multitude de goutellettes très petites et bien réparties dans la chambre de combustion. De nombreuses études expérimentales ou numériques se focalisent sur ce phénomène pour mieux comprendre les mécanismes liés au fractionnement du spray. Celles-ci analysent le comportement de la zone dispersée du spray et supposent souvent que les structures étudiées sont toutes de forme sphérique.

Cependant il reste très difficile d'avoir des informations précises sur les premières instabilités causant le fractionnement du spray, excepté sur quelques cas académiques comme le jet de Rayleigh [1]. Mais des techniques récentes nous permettent d'extraire des informations sur la zone primaire du jet comme les méthodes de suivi d'interface ou bien l'imagerie ballistique. Dans ce mémoire, nous nous focalisons sur l'aspect numérique et plus précisément sur la description de l'atomisation à l'aide de méthodes de suivi d'interface. Ces méthodes sont intéressantes car elles captent implicitement la

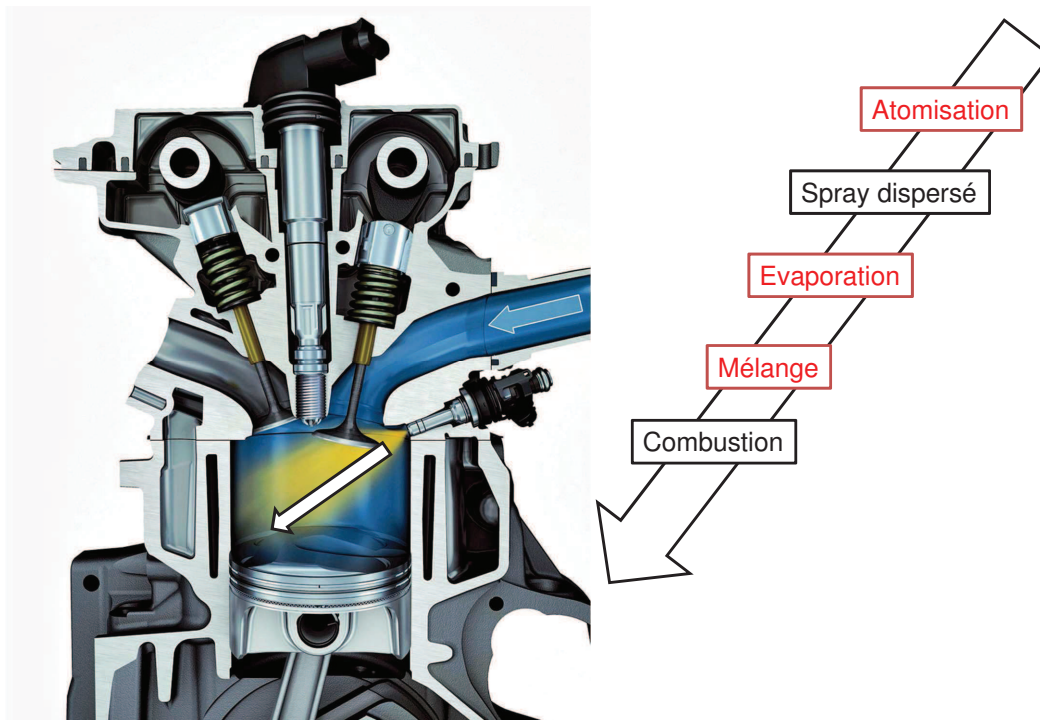


FIGURE 1 – Représentation schématique des processus physiques au sein d’une chambre de combustion automobile. En rouge : processus étudié au cours de cette thèse.

morphologie du spray et ne sont pas limitées à des structures liquides sphériques. De plus, elles permettent non seulement l’étude de l’atomisation mais s’appliquent aussi à d’autres domaines comme l’hydraulique ou encore l’ébullition par exemple.

Cette étude, au delà de l’atomisation, traite également de l’évaporation dans la zone dense du spray. Notons que l’évaporation est un phénomène difficile à capturer expérimentalement et numériquement dans la zone dense du spray, il existe peu d’études sur ce sujet dans la littérature. Concernant l’aspect expérimental, il est difficile d’obtenir des informations avec les techniques standards à cause du brouillard généré par la vapeur, des méthodes spécifiques doivent être mises en oeuvre.

Du point de vue numérique la principale raison réside dans le fait que le phénomène d’évaporation est assez complexe à résoudre directement à cause du fort couplage entre les transferts de masse et de chaleur à l’interface. Ce phénomène est très localisé et dépend des gradients de température et d’espèces de part et d’autre de l’interface, et influence la position de l’interface. Certaines études combinent l’évaporation et les méthodes de suivi d’interface mais s’affranchissent de ce problème en négligeant la régression d’interface, ou bien en supposant une régression simplifiée suivant le rayon

pour une structure liquide supposée rester sphérique tout au long de la simulation. Il existe de multiples degrés de simplification pour traiter l'évaporation, dans notre mémoire nous nous focalisons sur la résolution directe des équations liées à l'évaporation. Par conséquent, notre méthode est beaucoup plus coûteuse que les études susmentionnées, mais aussi plus précise.

Le manque d'étude sur ce sujet est problématique car le traitement de l'évaporation est l'une des améliorations logiques des méthodes de suivi d'interface pour atteindre le but final qu'est la combustion. Les études de l'évaporation d'un spray couplé avec la combustion existe déjà dans la littérature (par exemple [2, 3, 4, 5]), mais celles-ci repose sur l'hypothèse de sphéricité ainsi que sur des modèles d'évaporation. Ces modèles utilisent fréquemment des hypothèses fortes sur la thermodynamique et la dynamique des gouttes souvent considérées comme étant dispersées, par conséquent ils ne sont adaptés à l'étude d'un spray dense.

Pour résoudre numériquement ces deux processus dans la zone dense du spray, il est possible d'utiliser trois formalismes différents : l'approche RANS qui consiste à résoudre les équations moyennées de Navier-Stokes, l'approche LES (simulation aux grandes échelles) qui consiste à résoudre les équations filtrées de Navier-Stokes et enfin l'approche DNS (simulation numérique directe) où l'on résoud directement les équations de Navier-Stokes.

La description de la zone dense par des approches moyennées est délicate et il existe peu de modèles dans la littérature concernant la zone dense. Ces approches sont néanmoins privilégiées par la communauté industrielle car le temps de calcul nécessaire est généralement faible, on peut donc réaliser de nombreux calculs dans un temps relativement court. Contrairement à l'approche DNS, qui est beaucoup plus coûteuse en temps de calcul mais donne beaucoup plus d'informations sur l'écoulement étudié. La DNS peut servir de référence pour l'élaboration ou l'amélioration de modèles LES ou RANS dédiés à la zone dense.

Remarquons que le traitement de l'évaporation de manière directe reste un défi et qu'il n'existe pas, d'après nos connaissances, d'études de l'évaporation d'un jet diphasique turbulent par exemple. A fortiori, nous n'avons pas connaissance de modèles LES avec suivi d'interface pour traiter l'évaporation dans la zone dense du spray. Ce mémoire a pour objectif de combler ce manque et d'aller plus loin sur la prise en compte et la compréhension des phénomènes d'atomisation et d'évaporation. Il permet également de donner les moyens nécessaires à la réalisation de modèles LES d'évaporation applicables dans la zone dense du spray.

Plan du mémoire

Ce mémoire a pour objectif principal de proposer des analyses et des modèles pour les écoulements diphasiques denses inertes (ou réactifs) dans le régime de l'atomisation. Pour cela, nous introduisons les concepts généraux et les différentes échelles mises en jeu dans le processus d'atomisation et d'évaporation dans le chapitre 1. Nous décrivons également dans ce chapitre les études menées dans la littérature concernant ces deux sujets, nous notons un fort déficit d'études combinant le processus d'évaporation avec les méthodes de suivi d'interface.

Ensuite, le chapitre 2 décrit les méthodes numériques du code utilisé (code ARCHER) et met en avant une configuration originale pour étudier les écoulement diphasiques denses : la turbulence homogène isotrope diphasique (THID). Cette configuration plus fondamentale nous permet d'extraire des statistiques sur de nombreuses grandeurs telle que la densité d'interface (quantité de surface). Pour utiliser cette configuration, il est nécessaire de vérifier que la configuration turbulence homogène isotrope monophasique soit déjà bien résolue avant d'utiliser la configuration diphasique. Dans cet objectif, le code ARCHER est confronté à un code dédié à la turbulence monophasique (ASPHODELE), nous obtenons des résultats satisfaisants mais on observe une légère dissipation numérique dû à l'utilisation de schéma dissipatif de type WENO qu'il est important de surveiller. Une étude de convergence en maillage est également menée.

Puis, dans le chapitre 3 nous utilisons la configuration THID pour extraire des informations sur la densité d'interface et comparer sa valeur moyenne et son évolution temporelle obtenues avec la DNS avec celles obtenues avec le modèle ELSA utilisé en RANS pour décrire l'atomisation dans la zone dense du spray. Des moyennes d'ensemble sur trente-six simulations pour deux régimes d'atomisation différents (rupture et coalescence) et deux fraction volumique de liquide différentes sont réalisées. A l'aide de ces résultats, nous proposons une amélioration au modèle ELSA pour mieux prendre en compte l'évolution temporelle de la densité d'interface.

La même configuration est utilisée dans le chapitre 4 pour étudier l'évaporation et le mélange d'un scalaire passif. L'interface n'est pas modifiée par le processus d'évaporation, mais un scalaire passif équivalent à la fraction de mélange est produit à l'interface. Cette hypothèse implique que le temps de vaporisation est très grand devant le temps de mélange. Cette étude permet de visualiser les formes de PDF associées à la fraction de mélange, celles-ci nous montrent que les formes de β -PDF ne sont pas adaptées pour représenter le mélange dans le cas d'un écoulement diphasique dense.

Enfin, le chapitre 5 consiste à mettre en place une stratégie numérique pour résoudre le phénomène de vaporisation de manière directe. En se basant sur l'article

de Tanguy et al. [6], nous proposons notre formalisme pour résoudre l'évaporation avec la méthode Level Set. Cette méthode est ensuite validée à l'aide de plusieurs cas tests d'un point de vue dynamique et thermodynamique. Nous concluons sur un cas à fort gradient de température pour illustrer la robustesse et la précision de la méthode. Cette méthode nous paraît prometteuse et nécessite encore des développements pour l'adapter au couplage Level Set/VOF et au confinement.

Chapitre 1

Contexte général et état de l'art

Dans ce chapitre, nous présenterons les processus physiques étudiés durant cette thèse. Dans un premier temps, nous évoquerons le processus d'atomisation, ayant pour application directe l'injection diesel. Dans un second temps, nous présenterons le processus d'évaporation.

1.1 Processus d'atomisation

1.1.1 Importance du processus d'atomisation

Le processus d'atomisation est de première importance dans les moteurs à combustion interne. Dans ce système, on injecte une quantité de combustible sous forme liquide afin de le brûler sous forme gazeuse. Le processus d'atomisation permet de fractionner le jet liquide en de multiples gouttelettes qui, à l'aide du processus d'atomisation, vont devenir suffisamment petites pour pouvoir s'évaporer dans la chambre de combustion. L'évaporation du spray va libérer de la vapeur de combustible au sein de la chambre, qui, si elle est suffisamment bien mélangée, va pouvoir remplir les conditions nécessaires à l'allumage de la chambre. Cela va permettre au processus de combustion de prendre place. Ces 4 étapes (atomisation, évaporation, mélange et combustion) sont les processus à maîtriser pour obtenir un compromis idéal entre émissions polluantes et efficacité de la combustion. Ce processus d'atomisation est aussi important dans d'autres domaines. On peut citer l'administration de médicaments par aérosols où les tailles de gouttes doivent être maîtrisée, ou encore le domaine agricole où l'arrosage des cultures doit être faite de manière précise et économe.

L'atomisation est séparable en trois zones distinctes : l'atomisation primaire, l'atomisation secondaire et enfin la zone diluée. Celles-ci sont décrites en Figure 1.1. Ces zones

présentent des propriétés particulières, nous proposons de les décrire dans les deux sections suivantes.

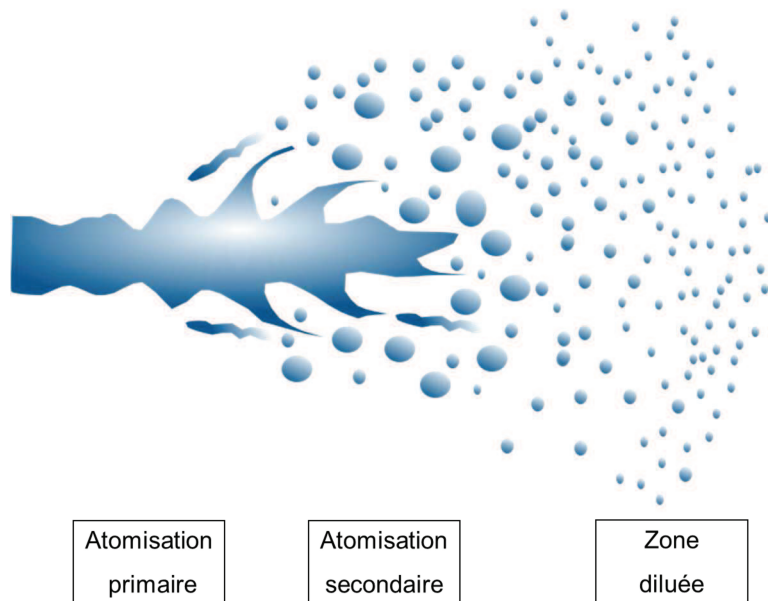


FIGURE 1.1 – Description du processus d'atomisation.

1.1.2 Atomisation primaire ou Zone dense

De manière générale, Le liquide est injecté à forte vitesse et à un fort taux de turbulence dans un gaz au repos. Par conséquent, ce liquide va être destabilisé par les instabilités de turbulence naissant à l'interface liquide-gaz, dûes au fort taux de cisaillement entre le coeur liquide et le gaz.

Ces instabilités vont croître, jusqu'à produire un détachement de structures liquides du coeur liquide. Ces structures restent relativement grandes par rapport à la taille du coeur liquide.

La région de naissance des instabilités et des premiers détachements de paquets liquides est appelée atomisation primaire, ou zone dense du spray. Dans ce manuscrit de thèse, nous nous focaliserons principalement sur cette région.

1.1.3 Atomisation secondaire et zone diluée

L'atomisation secondaire prend place directement après l'atomisation primaire. Les paquets liquides produits lors de l'atomisation primaire peuvent interagir entre eux. Par exemple, deux structures liquides peuvent se rencontrer et former une seule entité, c'est le phénomène de coalescence. Cependant, si les vitesses des deux structures liquides sont très différentes, un autre phénomène peut se produire, elles vont se rencontrer violemment et créer de nouvelles structures liquides. Ces interactions sont classées dans la littérature suivant l'intensité du choc (vitesse) et l'angle d'impact des deux structures liquides ([7] par exemple). Nous ne détaillerons pas dans cette section les multiples régimes de collision/coalescence. Le lecteur intéressé peut se référer aux travaux de Qiang et Law [8].

Enfin, très loin de l'injecteur, les structures liquides n'interagissent plus ou très peu entre elles. Elles sont dans le cas de l'injection diesel d'une taille légèrement supérieure au micromètre. A cette échelle, les forces de tension de surface vont devenir dominante et minimiser la surface à son maximum, ce qui a pour effet de les rendre sphériques. Cette zone est appelée zone diluée ou zone dispersée.

1.1.4 Approches expérimentales

De nombreuses études expérimentales de mesure de l'atomisation et des sprays existent sur la zone dispersée. On peut citer le PDA (Phase Doppler Anemometry) et la granulométrie laser (Malvern) qui permettent d'extraire des distributions volumiques ou numériques de tailles de gouttes d'un spray, certains diagnostics permettent également d'obtenir la vitesse des particules. La quasi totalité de ces méthodes supposent que les structures analysées sont sphériques, rendant leur utilisation caduque dans la zone dense où dans des sprays mal ou peu atomisés (présentant des gouttes sphériques mais aussi de larges ligaments par exemple).

Concernant la zone dense, de nouvelles méthodes expérimentales sont nécessaires pour capturer le coeur liquide et ses instabilités. La plupart de ces nouveaux procédés sont à leur début, on peut citer des résultats encourageant utilisant l'imagerie ballistique [9, 10] (Voir Figure 1.2) ou encore l'utilisation des rayons X [11, 12, 13] (voir Figure 1.3). On peut citer l'importante review réalisée par Dumouchel [14] concernant les techniques expérimentales dédiées à l'atomisation primaire. Malgré une communauté très active, ces méthodes expérimentales nécessite encore de nombreux développements. Il est difficile (à l'heure actuelle) d'obtenir des analyses quantitatives poussées comme, par exemple, une cartographie des vitesses au sein du spray.

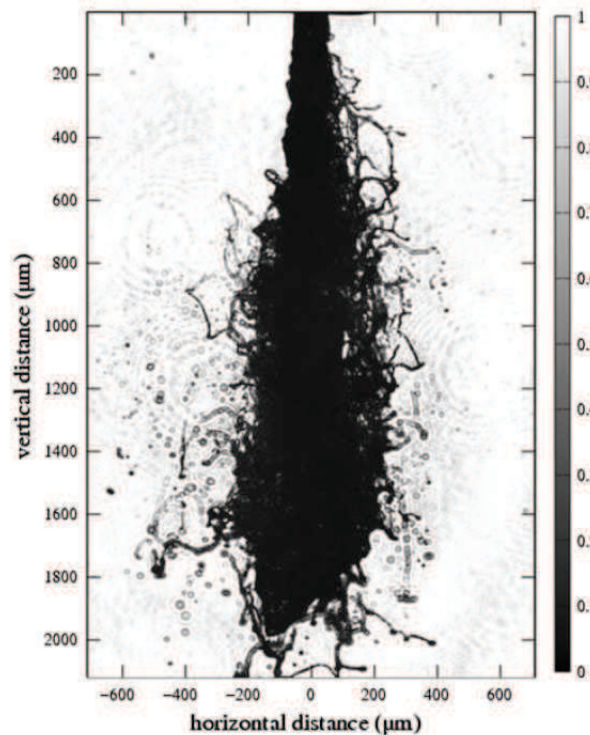


FIGURE 1.2 – Exemple de résultat obtenu avec l'imagerie ballistique. Image d'un jet diesel produit par un injecteur monotrou. Résultats de Sedarsky et al. [10]

A contrario, la simulation numérique (directe ou moyennée) d'atomisation peut être utilisée à cette fin, rendant disponible de larges bases de donnée concernant la dynamique ou la topologie du spray.

Cependant la simulation numérique est complémentaire à l'expérience. En effet, une validation des résultats est nécessaire pour prouver le réalisme de ces simulations. Cette validation confronte les résultats expérimentaux (ou théoriques) aux résultats des simulations effectuées.

1.2 Simulation numérique et modélisation de l'atomisation primaire

Dans cette section, nous présentons les trois formalismes principaux utilisés pour résoudre numériquement le processus d'atomisation couplé avec les équations de Navier-Stokes.

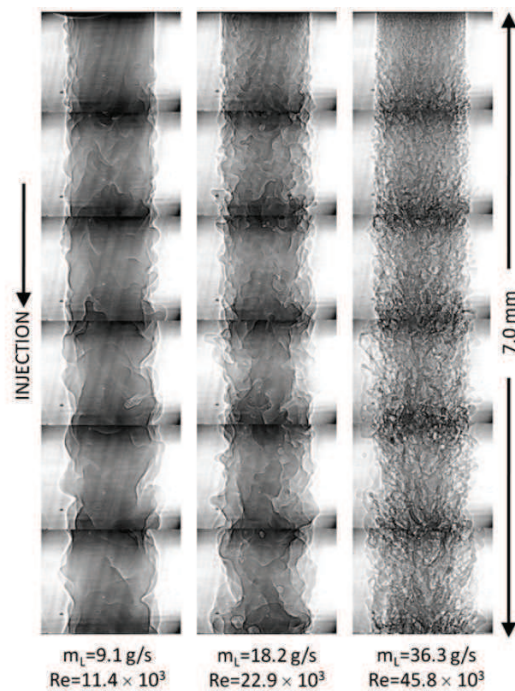


Fig. 1. Composite X-ray images of pure-liquid jets injected into a quiescent environment at various liquid flow rates.

FIGURE 1.3 – Exemple de résultat obtenu avec l'utilisation des rayons X, extrait des travaux de Lin et al. [13]

1.2.1 Résolution directe des équations : formalisme DNS

Dans ce formalisme, les équations de Navier-Stokes sont résolues directement. C'est à dire que les variables considérées sont résolues de manière instantanées et locales.

1.2.1.a Description et Résolution de la turbulence

La turbulence d'un écoulement est caractérisée par la présence d'une multitude de tourbillons de différentes tailles (ou échelles). Ces tourbillons échangent de l'énergie en permanence entre eux, et la turbulence doit être entretenue sous peine d'être dissipée par les plus petits tourbillons. L'entretien de la turbulence est réalisée à l'aide des grandes échelles tourbillonnaires qui vont apporter, en permanence, de l'énergie fluctuante. Cette énergie va ensuite être transférée aux échelles par un phénomène de cascade, et l'énergie sera dissipée par les plus petites échelles de l'écoulement. Ce phénomène est décrit schématiquement dans la Figure 1.4.

L'intensité de la turbulence varie en fonction du nombre de Reynolds considéré qui

représente le ratio entre les forces d'inerties et la viscosité. Plus celui-ci est élevé, plus la turbulence est étendue (en terme d'échelle).

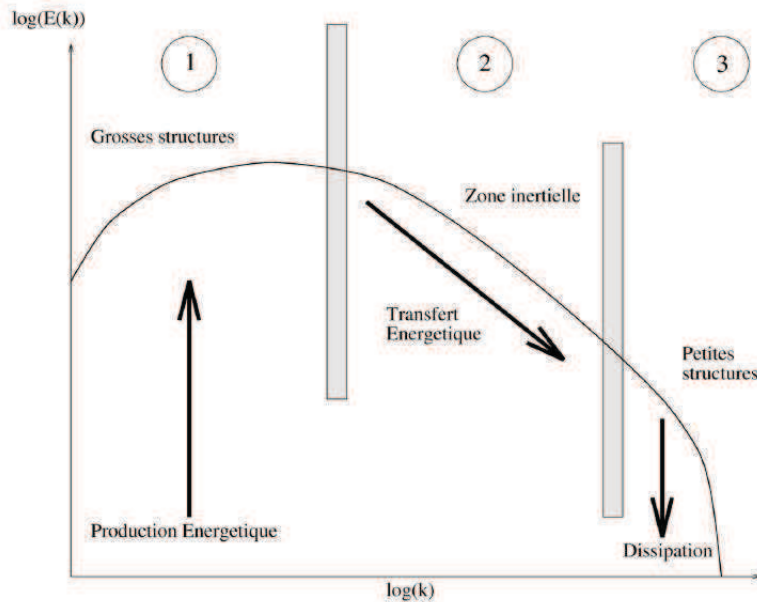


FIGURE 1.4 – Représentation schématique du spectre de turbulence

La plus petite échelle de l'écoulement est appelée échelle de Kolmogorov η , elle porte le nom de son découvreur. En considérant une Turbulence Homogène Isotrope monophasique (THI) et un nombre de Reynolds infiniment grand, celui-ci a décrit la fameuse "théorie K41" [15]. Ces travaux ont permis de caractériser la turbulence grâce à des paramètres clés comme le taux de dissipation et l'énergie cinétique turbulente, ainsi que le phénomène de cascade énergétique.

La turbulence contient donc une large gamme d'échelle. Pour réaliser une simulation numérique directe (DNS), il est indispensable de résoudre correctement ces échelles, en particulier celle de Kolmogorov qui dissipe l'énergie. Celle-ci est directement dépendante du nombre de Reynolds (plus ce nombre est grand, plus l'échelle de Kolmogorov est petite). C'est pourquoi les simulation numériques sont sévèrement limitées par le nombre de Reynolds de l'écoulement étudié. Lorsque que l'on considère des écoulements à très haut nombre de Reynolds, d'autres approches sont adoptées. L'approche RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes) consiste à résoudre les équations moyennées de Navier-Stokes, tandis que l'approche LES (simulation aux grandes échelles) résout avec précision les grandes échelles de l'écoulement de la même manière qu'en DNS et en modélisant les plus petites échelles de l'écoulement

à l'aide de termes de sous mailles. L'approche RANS est moins coûteuse que la LES, et est fréquemment utilisée dans le milieu industriel. Dans le cadre de cette approche, l'un des modèles les plus connus est le modèle $k - \epsilon$, qui introduit les équations de transport de l'énergie cinétique turbulente et de la dissipation moyenne.

La LES commence à être introduite dans l'industrie grâce à l'augmentation des moyens de calculs, et permet d'obtenir des informations supplémentaires (effets instationnaires), non disponible en RANS.

Cette présentation succincte introduit les concepts de la résolution de la turbulence, pour plus de détails, le lecteur intéressé peut se référer au livre de Pope [16] ou Lesieur [17].

De plus, lorsque que le processus d'atomisation est pris en compte, il faut considérer les nombreuses discontinuités liées à l'interface. Celles-ci ajoutent aussi leurs limitations à la DNS standard monophasique.

1.2.1.b Prise en compte d'une interface

La présence d'une interface au sein de l'écoulement doit être prise en compte explicitement dans les codes de DNS. Les méthodes de suivi d'interface sont relativement récentes, l'une des premières est la méthode Level Set, proposée initialement par Osher et al. en 1988 [18] et améliorée par de nombreux auteurs par la suite [19, 20, 21, 22]. Cette méthode utilise une équation de transport de scalaire passif pour représenter l'interface. Ce scalaire représente la distance à l'interface, et l'isocontour zéro représente la position de l'interface. Cette propriété doit être conservée au cours de la simulation à l'aide d'une étape de redistance, introduite dans l'article de Sussman et al. [20]. Cette méthode est l'une des plus simples pour décrire et suivre l'interface, elle permet également d'obtenir les caractéristiques géométriques de l'interface comme la courbure de façon simple et précise (à l'ordre 2). Cependant, la Level Set conserve difficilement la masse en cas de fort cisaillement ou de maillage trop grossier, c'est l'inconvénient majeur de cette méthode. Elle est cependant toujours très utilisée dans la littérature [23].

Pour pallier à ce problème, Olsson and Kreiss [24] ont proposé une méthode Level Set dite "conservative" (ACLS : Accurate Conservative Level set), plus complexe à mettre en oeuvre. Celle-ci améliore grandement la conservation de la masse en rajoutant un terme de compression dans l'équation de transport de la Level Set. Ce concept a été repris par Desjardins [25] pour la simulation de jets diesel. Une autre variante proposée par Herrmann [22] est d'utiliser une sous grille pour la level set afin d'améliorer la description de l'interface.

Une autre méthode très répandue est la méthode Volume Of Fluid (VOF) (initiale-

ment proposée par Hirt et Nichols [26]). Elle consiste à introduire un scalaire passif valant 1 dans le liquide et 0 dans le gaz. Dans les cellules contenant l'interface, ce scalaire vaudra une valeur entre 0 et 1 correspond au ratio du volume de liquide sur le volume total de la cellule. Cependant, cette information n'est pas suffisante pour pouvoir caractériser l'interface correctement. Il est indispensable de connaître la courbure et la normale de l'interface pour prendre en compte le saut de pression à l'interface. C'est pourquoi la méthode VOF est généralement associée à une méthode de reconstruction d'interface comme la méthode PLIC (Piecewise Linear Interface Calculation) proposée par Gueyffier [27]. Dans cette méthode, chaque cellule contenant l'interface est traitée, et l'interface est définie par un plan (en 3D, une droite en 2D). Avec cette information supplémentaire il est possible d'obtenir les caractéristiques géométriques de l'interface, c'est à dire la surface, la normale et la courbure de l'interface. Malgré cet avantage, la précision de la méthode n'est que d'ordre 1. Il existe des améliorations pour améliorer la précision à l'ordre 2, et aussi d'autres méthodes de reconstruction. Ici, nous nous limitons à présenter une des plus référencées et donnant de très bon résultats. Il est important de rappeler que la méthode de reconstruction est très importante pour la définition de la VOF, sans cette étape, les résultats s'en retrouvent fortement dégradés. L'atout principal de cette méthode est son excellente conservation de la masse, mais la description géométrique de l'interface est moins bonne que la méthode Level set présentée précédemment. Elle est aussi plus complexe à mettre en oeuvre. On peut citer l'équipe de Zaleski qui travaille beaucoup sur la méthode VOF [28, 29, 30].

Il est possible de combiner les avantages des méthodes VOF et Level set, c'est le principe du couplage Level Set VOF (CLSVOF) proposée par Sussman et Puckett [31]. Chacune des méthodes est calculée indépendamment au début du pas de temps puis un couplage a lieu. Il consiste à imposer un léger déplacement suivant la normale à la méthode Level Set pour que le volume de liquide correspondent exactement au volume calculé par la méthode VOF, dans chaque cellule contenant une interface. Cette correction permet d'améliorer de façon significative la conservation de la masse. Les caractéristiques géométriques sont extraites de la Level Set pour une meilleure précision. Cependant, cette méthode est assez coûteuse en temps de calcul et son implémentation reste difficile. Cette méthode a été utilisée également pour simuler des jets diesel par Menard et al [32].

Les méthodes précitées sont Eulériennes, c'est à dire qu'elle sont résolues sur le maillage utilisé pour résoudre l'écoulement fluide. Il existe aussi des méthodes dites Lagrangiennes, qui utilisent des marqueurs en sous maille pour décrire l'interface. On peut citer la méthode front tracking proposée par Tryggvason dans les années 1990

[33] et améliorée sans cesse depuis [34, 35, 36]. Il existe aussi la méthode particule Level Set d'Enright [37, 38] et la méthode SPH [39, 40]. Ces méthodes décrivent très précisément la position de l'interface mais souffrent des problèmes inhérents au formalisme Lagrangien : parallélisation difficile, nécessité d'une répartition intelligente des marqueurs, les changements topologiques comme la coalescence et la rupture ne sont pas pris en compte implicitement.

Cette liste des méthodes de suivi d'interface n'est évidemment pas exhaustive mais elle permet de mettre en avant les principales méthodes utilisées dans la littérature, ainsi que leurs défauts et qualités respectives. Rappelons que ces méthodes sont utilisées en diphasique au sens large du terme, c'est à dire que ces méthodes s'appliquent aussi bien en atomisation (voir Figure 1.5), que pour l'étude de l'ascension d'une bulle ou encore d'une collision de gouttes. Elles sont d'autant plus prometteuses qu'elles restent très générales. Cependant, il est impensable de simuler un spray totalement développé depuis l'atomisation primaire jusqu'à la phase dispersée à cause du coût prohibitif des DNS actuelles avec suivi d'interface. C'est pourquoi la phase dispersée reste simulée de façon lagrangienne encore aujourd'hui.

Enfin, un des problèmes majeurs des DNS avec suivi d'interface est la présence de discontinuités à travers l'interface. Par exemple, la masse volumique et la viscosité sont discontinues à travers l'interface. Il est aussi possible d'observer un saut de pression dû aux forces de tension de surface. La résolution numérique d'un système présentant des discontinuités est fortement instable, des oscillations peuvent apparaître et fausser les résultats. Pour prendre en compte cette discontinuité, deux méthodes peuvent être utilisées : la fonction delta et la méthode Ghost Fluid [42]. La première va lisser les discontinuités, l'interface va être épaissie artificiellement. Cette méthode est discutable car suivant l'épaisseur de l'interface choisie, les résultats seront différents. La seconde méthode est plus rigoureuse, elle utilise une interface d'épaisseur nulle, c'est à dire que les termes sauts vont être injecté directement dans des cellules fantômes (ou "Ghost") pour préserver la continuité de la variable considérée. Nous reviendrons en détails sur cette méthode dans les chapitres suivants. Cette méthode est très utile pour appliquer les conditions de saut, cependant elle nécessite la connaissance de la distance à l'interface pour être appliquée. Cela implique d'avoir une fonction de type Level Set (ou équivalent) dans le code de calcul. Pour le lecteur intéressé, une comparaison détaillée de ces deux approches a été réalisées dans la thèse de Tanguy [43] pour différents cas tests. Dans toutes les configurations considérées, la méthode Ghost Fluid est plus précise que la méthode delta.

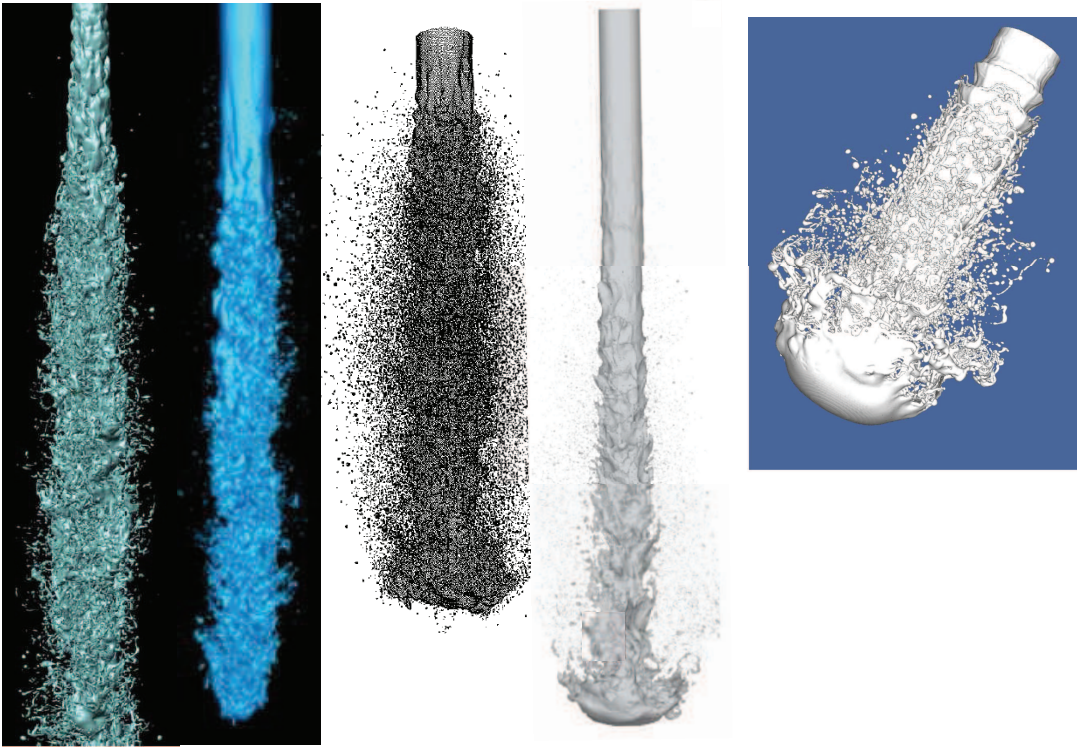


FIGURE 1.5 – Calcul d'atomisation primaire obtenus avec différentes méthodes de suivi d'interface. De gauche à droite : CLSVOF (Menard et al [32]), ACLS (Desjardins et al [25]), RLSG (Herrmann [22]), CLSVOF (Shinjo et Umemura [41]), VOF (code Gerris)

1.2.2 Modélisation de l'atomisation primaire

Les coûts des simulations numérique directe étant très élevés, il n'est pas possible de les utiliser dans des géométries complexes à grande échelle. Dans ces cas précis, c'est la modélisation qui est utilisée. Cela permet d'étudier le développement du spray de l'atomisation primaire à la zone diluée. Dans ce formalisme, l'atomisation primaire est assimilé à une condition d'injection, dont le résultat est la production de goutelettes sphériques que l'on suivra de manière Lagrangienne. Il est important de rappeler que l'hypothèse de sphéricité n'est pas applicable dans cette région. Par conséquent, la description de cette région nécessite des modèles spécifiques. Dans ce paragraphe nous détaillons uniquement les principaux modèles dédiés à l'atomisation primaire.

Concernant la zone dense, le principal modèle utilisé se nomme WAVE. Initialement proposé par Reitz [44], ce modèle se base sur la naissance des instabilités de type Kelvin-Helmoltz dans une configuration d'un injecteur à jet rond cylindrique. Initialement, on injecte un "blob" de liquide qui va se fragmenter en fonction de la longueur

d'onde et du taux d'accroissement des instabilités. Ces deux quantités sont liés principalement au nombre de Weber et d'Ohnesorge (par une corrélation). La fragmentation de ce "blob" crée des gouttes sphériques d'un rayon dépendant de la longueur d'onde de l'instabilité. La fragmentation n'est pas instantanée, elle est réalisée pendant un temps de rupture, lui aussi donné par une corrélation (voir Figure 1.6). Cependant ce modèle utilise deux constantes qu'il est nécessaire d'ajuster en fonction de la simulation effectuée. On peut également regretter que ce modèle ne prend pas en compte la morphologie classique de l'atomisation primaire, c'est à dire un coeur liquide où les instabilités crée des ligaments et seulement une faible proportion de goutelette sphériques.

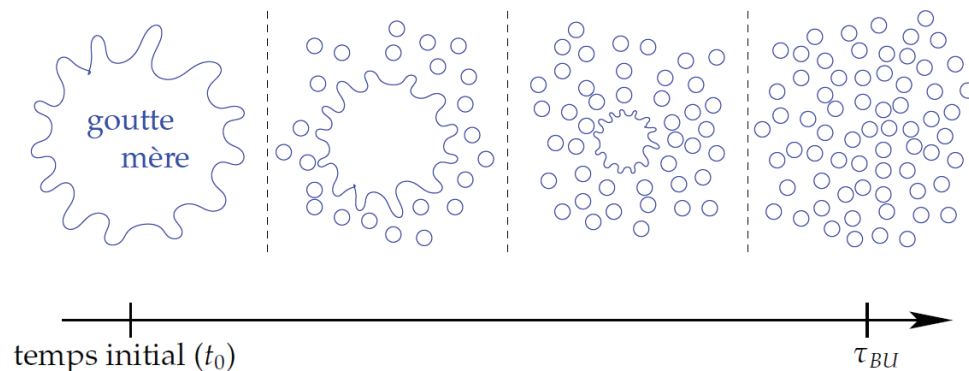


FIGURE 1.6 – Désintégration d'une structure liquide selon le modèle WAVE.

Un autre modèle, proposée par Gorokhovski et al. [45, 46, 47], utilise un formalisme stochastique pour représenter le coeur liquide et les structures liquides. Cette approche se rapproche de celle utilisée par Kolmogorov pour la turbulence [15], mais dans le contexte de l'atomisation. On suppose la fréquence de fragmentation du coeur liquide très élevée pour considérer qu'il obéit à un phénomène de "rupture en cascade" (hypothèse de similarité d'échelles). Des parcelles stochastiques sont introduites dans le domaine gazeux et suivies par une approche Lagrangienne. A partir de leur trajectoire et leur temps de vie, il est possible de connaître leur appartenance au coeur liquide et par conséquent d'obtenir la fraction volumique moyenne de liquide dans les cellules considérées.

Une autre manière de modéliser l'atomisation primaire est le modèle ELSA (Eulerian Lagrangian model for Spray and Atomization). Initialement proposé par Vallet et Borghi en 1999 [48], ce modèle utilise une grandeur plus générale et plus adaptée à la morphologie d'un spray dense : la densité d'interface. Cette quantité représente

le ratio entre la surface de l'interface liquide-gaz et le volume de la cellule considérée. Ainsi, la densité de surface peut traiter aussi bien une gouttelette sphérique, que le coeur liquide très déformé. Dans ce modèle, on présuppose que la turbulence est le moteur du phénomène de rupture du jet, en représentant l'aspect diphasique par un seul fluide contenant un mélange de deux phases. Cette approche est opposée au principe du modèle WAVE qui considère que ce sont les instabilités qui jouent un rôle majeur, et non la turbulence. Différents termes sources ou puits sont ajoutés pour prendre en compte des phénomènes tels que l'évaporation, la rupture et la coalescence par exemple. Le modèle ELSA a également été utilisé pour réaliser des LES d'atomisation [49, 50, 51]. Dans ce contexte, l'interface reste décrite avec une méthode de suivi d'interface, mais des termes de sous maille sont introduit pour modeliser la partie non résolue du spray (au niveau de l'interface et de la turbulence). Ce modèle a également des paramètres à imposer mais nous déterminerons ceux-ci en utilisant la DNS. Nous irons également plus loin dans la présentation de ce modèle dans le chapitre 3.

Ces modèles sont très attractifs et certains sont déjà utilisé par les industriels, cependant, ces modèles nécessitent souvent une calibration pour corroborer avec l'expérience. De plus, certains processus physiques sont négligés ou mal décrit, comme la cavitation ou la vaporisation par exemple. C'est pourquoi il est nécessaire d'améliorer continuellement les modèles, notamment à l'aide de la DNS.

En Figure 1.7 se trouve un récapitulatif des différents formalismes utilisés pour résoudre l'atomisation primaire (DNS, LES, RANS), avec les échelles correspondant à chaque simulation. Le modèle utilisé est le modèle ELSA dans cette illustration.

1.3 Evaporation

1.3.1 Description du processus d'évaporation

L'évaporation est un changement de phase liquide-gaz, ayant lieu à l'interface. Le taux d'évaporation est fonction des propriétés thermodynamiques locales à l'interface (température, pression, fraction massique de vapeur). L'énergie utilisée lors du changement provient généralement du flux de chaleur gazeux, mais elle peut également être prélevée au liquide si le flux d'énergie apportée par le gaz est insuffisant. Dans ce cas, on observe un refroidissement de la structure liquide. Nous reviendrons sur ce point lors de l'établissement des équations régissant l'évaporation dans le chapitre 5. Un flux de vapeur est libéré à l'interface liquide-gaz. La présence de deux espèces chimiques (une produite : la vapeur d'eau et une résiduelle : l'air) entraîne la création d'un flux de Stefan. Un flux massique de vapeur est produit et éjecte la vapeur dans la direction

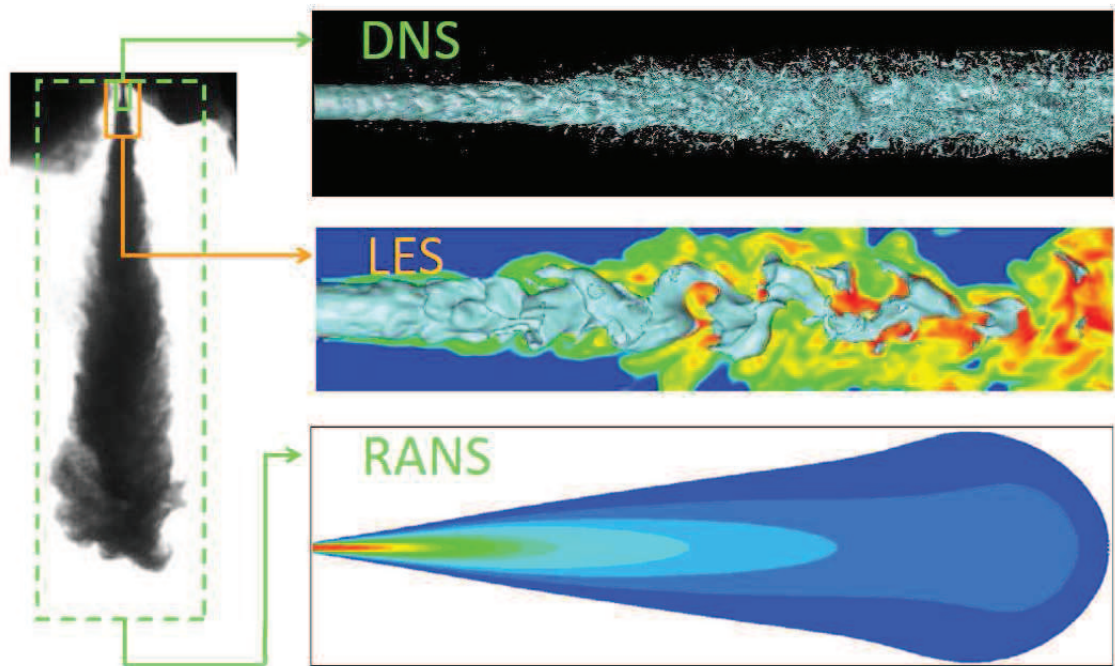


FIGURE 1.7 – Récapitulatif des différents formalismes utilisés pour la simulation et la modélisation de l’atomisation primaire. Représentation des échelles résolues par chaque formalisme (comparé à un jet expérimental). Utilisation du modèle ELSA pour les formalismes LES et RANS. De haut en bas : DNS de Menard et al. [32], LES de Chesnel et al. [51], simulation RANS de Lebas et al. [52]

normale à l’interface. Par conséquent, le gaz environnant est déplacé à cause de la production de vapeur. La vapeur va être transportée et diffusée dans le gaz, et l’interface liquide gaz se déplace en fonction du taux d’évaporation.

Comme on peut le constater, l’évaporation est un phénomène complexe (illustré en Figure 1.8), couplant plusieurs variables thermodynamiques (température, espèces, pression) et dynamiques (flux de Stefan). Un autre problème provient des temps caractéristiques mis en jeu. Le temps de vie d’une structure liquide (c’est à dire le temps nécessaire à l’évaporation complète de cette structure) est très grand devant le temps de diffusion de la vapeur produite par évaporation. D’après l’étude théorique et asymptotique de Umemura et al. [53], le temps de vie d’une goutte est supérieur au temps de diffusion par un facteur d’au moins égal au rapport de densité des deux fluides considérés ($\frac{\rho_l}{\rho_g}$). Ainsi, si l’on considère de l’eau, il faut approximativement mille fois le temps de diffusion pour vaporiser entièrement la goutte. Par conséquent, ce phénomène physique

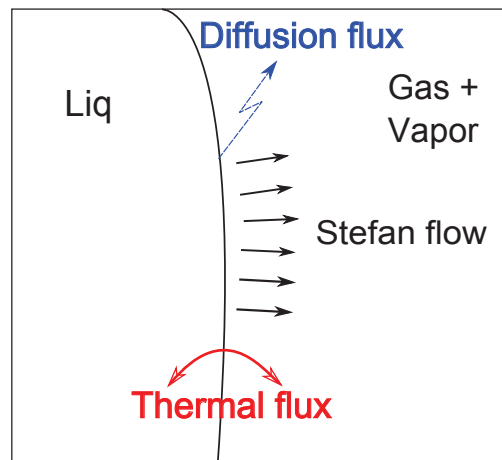


FIGURE 1.8 – Représentation schématique instantanée du processus d'évaporation. Le flux de masse total est la somme du flux de diffusion et du flux de Stefan.

est grandement multiéchelles, rendant la résolution numérique d'un tel système complexe (contraintes fortes sur le pas de temps). C'est pourquoi de nombreux efforts ont été réalisés pour trouver des hypothèses simplificatrices, permettant de prendre en compte l'évaporation d'un spray, par exemple.

Dans la plupart des études, on émet l'hypothèse d'un flux de Stefan faible comparé à la convection du gaz environnant. Cela simplifie la prise en compte de l'évaporation, mais entraîne une surévaluation du taux d'évaporation [54]. De plus, dans un spray dense, le flux de Stefan peut devenir suffisamment important pour influencer la dynamique des structures liquides [53]. Il est également possible de s'affranchir des gradients de températures au sein du liquide en supposant une conductivité infinie. Cela impose que l'ensemble de l'énergie utilisée pour le changement de phase provient du gaz. Une autre simplification intéressante est de supposer l'ensemble des structures liquides sphériques, permettant l'écriture des équations en coordonnées sphériques. Ainsi les équations d'évolution ne dépendront (spatialement) que du rayon de la goutte. Ces hypothèses sont fréquemment utilisées dans les méthodes Lagrangiennes que nous allons décrire dans la section suivante.

1.3.2 Méthodes Lagrangiennes et modèles d'évaporation standard

L'évaporation a été étudiée de manière intensive pour des spray dispersée à l'aide de méthodes Lagrangiennes. On suit de manière Lagrangienne (en sous maille) une multitude de gouttelettes supposées sphériques (hypothèse vraisemblable dans un

spray dispersé), chacune ayant une vitesse et un diamètre. La phase porteuse (le gaz) est résolue en DNS ou en LES, et sa dynamique peut être affectée (ou non) par les particules. L'évolution de ces particules est liée à la phase porteuse aussi bien par sa dynamique que par ses conditions thermodynamique. En fonction de la température du gaz, les particules vont s'évaporer jusqu'à leur disparition. Numériquement parlant, les particules obéissent à un modèle d'évaporation. Il existe de nombreux modèles d'évaporation, plus ou moins complexes. La plupart sont détaillés dans le livre de Sirignano [55]. Nous reviendrons uniquement sur la loi du D^2 dans le chapitre 5. Elle consiste à considérer une diminution de la surface linéaire en temps.

L'évaporation des particules va générer de la vapeur de carburant, le mélange de cette vapeur est très important lorsque l'on s'intéresse à la combustion [56]. Plusieurs études ont permis d'analyser l'influence du diphasique sur le comportement de la flamme [57, 58].

Tout ces modèles supposent que la taille des particules sphériques est très inférieure à la taille de maille utilisée pour résoudre l'écoulement sur le maillage eulérien. Il est évident que ces deux hypothèses (sphéricité et taille des particules) sont fausses dans le cas de l'atomisation primaire. En revanche, l'approche Lagrangienne reste la méthode la plus commune pour étudier des spray dispersés.

1.3.3 Description fine de l'évaporation par simulation directe

1.3.3.a Définition de la DNS d'évaporation

La résolution de l'évaporation par DNS reste un sujet difficile, il existe de nombreuses manières de l'aborder, chacune ayant des degrés de précision différents.

Les études traitant ce processus physique résolvent en général les deux phases (liquide et gazeuse) de manière directe, c'est à dire à partir des équations de Navier-Stokes. La prise en compte du processus d'atomisation nécessite des équations supplémentaires pour l'enthalpie (ou la température) et la fraction massique de vapeur.

Les différences d'approche apparaissent lors du calcul du taux d'évaporation local. Si on résout vraiment le problème de manière directe, le taux d'évaporation est calculé à partir des relations de saut liées à l'évaporation. Nous reviendrons sur ces conditions en détail dans le chapitre 5. Obtenir le taux d'évaporation de cette manière n'est pas aisée, il faut réussir à capturer les gradient thermiques et massiques de part et d'autre de l'interface. Une résolution très fine est donc nécessaire pour ne pas surestimer le taux d'évaporation. C'est pourquoi la plupart des études traitant l'évaporation avec les méthodes de suivi d'interface se placent dans des cas simples : une goutte sphérique

mobile ou non dans un domaine au repos.

Pour pallier à ce problème, certaines études ([59, 60] par exemple) utilisent un modèle pour obtenir le taux d'évaporation. Généralement une méthode VOF est utilisée pour capturer les déformations de l'interface. L'utilisation d'un modèle implique quelques concessions : le flux de Stefan n'est en général pas pris en compte, seule la diffusion de la concentration de vapeur est considérée.

Une autre solution est de résoudre uniquement le gaz, avec des conditions limites à l'interface. La phase liquide est considérée sphérique, et son taux d'évaporation est calculé à partir des modèles standard d'évaporation. L'interface est indéformable dans ce cas précis, et le taux d'évaporation calculé est global sur l'ensemble de la sphère. Le principal intérêt de cette approche est de pouvoir capturer les interactions de la phase liquide avec le gaz, comme les forces de traînée par exemple.

L'appellation "DNS d'évaporation" est donc sujette à caution. De plus, nous n'avons pas détaillé les méthodes numériques utilisées dans les approches précitées. Dans la plupart des études dédiées à l'évaporation, l'application des conditions limites à l'interface et la prise en compte des discontinuités sont peu discutées ou détaillées, alors qu'elles sont de première importance pour estimer correctement le taux d'évaporation. Par exemple, les discontinuités sont souvent lissées, car les auteurs utilisent une méthode VOF dans la quasi totalité des études, ce qui empêche l'utilisation de la méthode Ghost Fluid. L'utilisation d'un lissage ne permet pas de réaliser une étude de convergence en maillage propre, car les résultats dépendent de l'épaisseur de la zone de lissage. D'autre part, les conditions limites à l'interface sont souvent appliquées à l'ordre 0.

Notre objectif étant de créer des modèles d'évaporation basés sur des simulations les plus réalistes possible, nous retiendrons les méthodes les plus proches de la définition de la simulation numérique directe. Ces modèles seront capables de s'affranchir du calcul exact des gradients tout en représentant correctement le processus de vaporisation. Par conséquent, nous allons détailler les méthodes utilisant les gradients thermiques et massiques pour calculer le taux d'évaporation, et prenant en compte la discontinuité de vitesse (à l'origine du flux de Stefan). On note également qu'il n'existe aucune LES d'atomisation avec suivi d'interface incluant l'évaporation, notamment à cause de la difficulté de réaliser des DNS d'évaporation de référence. Les travaux de cette thèse ont pour objectif de poser une DNS d'évaporation suffisamment précise pour pouvoir, dans un futur proche, élaborer des modèles et les comparer avec la DNS.

1.3.3.b Etat de l'art

Lorsque l'on s'intéresse au changement de phase couplé avec les méthodes de suivi d'interface, on s'aperçoit que les études sont relativement récentes. L'un des premiers à l'avoir étudié est Welch [61] avec un maillage mobile 2D suivant l'interface dans le domaine de l'ébullition, mais cet auteur était limité par la puissance de calcul et par son maillage mobile qui n'était pas capable de suivre les fortes déformations de l'interface. Cependant ces travaux étaient capable de prendre en compte le flux de Stefan et les conditions de saut liées à l'évaporation.

Calimez en 1998 [62] a été l'un des premiers à avoir couplé le changement de phase avec la méthode VOF dans le domaine de l'atomisation pour des écoulements diphasiques réactifs. Ce dernier a, lui aussi, été contraint de réaliser des simulations dans des domaines confinés et d'énoncer des hypothèses thermodynamiques fortes, étant donné les moyens de calcul de l'époque. Dans la même année, Tryggvason [63], dans le domaine de l'ébullition, a couplé le changement de phase avec la méthode front tracking, mais elle n'était pas capable de prendre en compte de fortes déformations à l'interface à cette époque.

Welch a de nouveau travaillé sur l'ébullition avec la méthode VOF [64], en insistant sur la discontinuité du gradient de température. Cependant il reconnaît que la discontinuité de vitesse n'est pas traitée de façon précise dans ce travail alors qu'elle nécessite un soin particulier.

Dans un contexte plus récent, Tomar [65] a traité ce problème avec un couplage Level Set/VOF, cependant les discontinuités à l'interface ne sont pas décrites avec précision, par conséquent les sauts de variables (masse volumique, viscosité...) à l'interface sont lissés sur plusieurs mailles. De plus, la vitesse de l'interface n'est pas définie clairement dans cet article, alors qu'elle est de première importance dans le cadre de l'évaporation.

En utilisant la Ghost Fluid Method de Fedkiw et al [42] (permettant de prendre en compte les sauts à l'interface) avec le formalisme Level Set, Tanguy [6] et Gibou [66] ont proposé un modèle de calcul de vitesse à l'interface pour satisfaire l'équation de continuité en présence de termes sources d'évaporation. Ces deux articles utilisent tout l'intérêt de la méthode Ghost Fluid, en utilisant des champs de vitesse étendus pour la prise en compte du saut de vitesse. Avec la méthode VOF, quelques auteurs [67, 68] ont étudié la vaporisation de goutte déformées, et ont aussi proposé un modèle de calcul de vitesse à l'interface pour satisfaire la conservation de la masse. Le principal inconvénient de ces méthodes est l'étalement des discontinuités (pas de méthode Ghost Fluid).

Cet état de l'art est relativement court mais ce sont les seules études correspondant globalement à au moins un de nos critères de sélection (évoqué dans le paragraphe précédent). Cela démontre également l'extrême nécessité de traiter le couplage interface/changement de phase. Dans cette liste, les seuls correspondant à tout nos critères sont les travaux de Tanguy [6] et Gibou [66] (Ghost Fluid + formalisme DNS). Nous nous baserons sur ces travaux pour le développement de notre formalisme DNS d'évaporation.

Chapitre 2

Validation et analyse d'un écoulement Turbulent Homogène Isotrope diphasique

L'objectif de ce chapitre est la validation d'une configuration Turbulente Homogène Isotrope Diphasique (THID). Cette configuration, académiquement intéressante car moins complexe qu'un jet liquide par exemple, nous permettra ensuite d'améliorer des modèles d'atomisation et d'étudier le mélange de la vapeur produite par évaporation. Cette configuration originale reprend la base des travaux de Luret et al. [69, 70, 71], en insistant sur la validation de cette géométrie particulière.

2.1 Introduction

Un des problèmes majeurs de la DNS diphasique est que la résolution nécessaire pour capturer les plus petites échelles de l'atomisation est inconnue, contrairement aux échelles de Kolmogorov (vitesse) ou de Bachelor (mélange) en monophasique. Même dans les simulations haute résolutions de Shinjo et al. [41], ou dans les études utilisant des méthodes de raffinement de maillage [72, 28], il est impossible de représenter les plus fines structures d'un jet liquide. Ce problème met en avant la nécessité de réaliser des modèles LES dédié au diphasique, pour pouvoir modéliser l'interface présente en sous maille. Il est également nécessaire de trouver des configurations plus simples pour s'assurer une résolution suffisante aussi bien au niveau de la turbulence que du diphasique.

De plus, la turbulence dans un jet liquide n'est pas maîtrisée, elle dépend de la

condition limite d'injection et l'énergie cinétique turbulente varie spatialement et temporellement. C'est pourquoi nous avons essayé de développer une configuration plus simple, et mieux maîtrisée. Une des configurations les plus intéressantes à nos yeux fut de reprendre l'idée de la turbulence homogène isotrope, qui est l'une des configurations de référence en turbulence monophasique, et de l'adapter au diphasique. La THID a été initialement développée par Gautier Luret durant sa thèse [73], mais la question de la validation de la turbulence n'a pas été clairement abordée. L'auteur se focalisant sur l'étude des collisions/coalescences de gouttes en milieu dense. Nous allons tenter de répondre à cette question en réalisant une étude détaillée de cette configuration, aussi bien en monophasique qu'en diphasique.

2.2 Equations résolues et Méthodes numériques

Dans les paragraphes suivants nous détaillons les méthodes numériques utilisées dans le code ARCHER pour les cas monophasiques et diphasiques. Notons que cette section constitue un rappel des méthodes et des équations résolues déjà présentes dans le code ARCHER, développées dans la thèse de Thibault Ménard et de Sébastien Tanguy [43, 74].

2.2.1 Equations résolues

2.2.1.a Equations de Navier-Stokes

La méthode CLSVOF est couplée avec une méthode de projection pour résoudre les équations de Navier-Stokes dans leur forme incompressible :

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} = -\frac{\nabla p}{\rho} + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot (2\mu \mathbf{D}) + \mathbf{f} + \frac{1}{\rho} \sigma \kappa |\nabla G| \delta(G) \mathbf{n} \quad (2.1)$$

Où p est la pression du fluide, \mathbf{U} le vecteur vitesse, μ la viscosité dynamique, et \mathbf{D} le tenseur des contraintes visqueuses. A l'interface, la tension de surface est repérée à l'aide la fonction de Dirac $\delta(G)$: σ est la tension de surface, \mathbf{n} le vecteur normal unitaire, κ est la courbure calculée à partir de la fonction Level Set G (les définitions de κ , \mathbf{n} et G sont donnés dans la section suivante). $|\nabla G|$ est la norme de la fonction level set G , égale à 1. \mathbf{f} correspond au terme de forçage que nous détaillerons également dans la section suivante.

Les dérivées spatiales pour les termes convectifs sont évaluées à l'aide d'un schéma WENO (Weighted Essentially Non-Oscillatory) d'ordre 5 conservatif [75]. Pour les ter-

mes diffusifs, un schéma centré d'ordre 2 est employé. L'intégration temporelle est réalisée à l'aide d'un schéma Runge Kutta d'ordre 3 (RK3). Le maillage utilisé est cartésien, en coordonnées décalées pour les vecteurs vitesses (maillage MAC). Contrairement aux variables scalaires (dont la pression) qui sont définies au centre des cellules.

La méthode de projection utilisée est d'ordre 1. Elle consiste tout d'abord à calculer une vitesse intermédiaire V^* à partir de l'équation de quantité de mouvement, mais en retirant le terme de pression.

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^n + \Delta t \left(-(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot (2\mu \mathbf{D}) + \mathbf{f} + \frac{1}{\rho} \sigma \kappa |\nabla G| \delta(G) \mathbf{n} \right) \quad (2.2)$$

La divergence de cette vitesse n'est pas nulle. Cependant, on cherche à obtenir une vitesse $n + 1$ à divergence nulle. Pour cela nous reintroduisons le terme de pression :

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \frac{\nabla p^{n+1}}{\rho} \Delta t \quad (2.3)$$

Puis on applique l'opérateur divergence sur l'équation précédente. L'équation de continuité impose une divergence nulle pour la vitesse $n + 1$, par conséquent $\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0$. Ce qui nous donne l'expression suivante :

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^* = \nabla \cdot \frac{\nabla p^{n+1}}{\rho} \Delta t \quad (2.4)$$

Cette équation de Poisson est résolue à l'aide d'un solveur de type Gradient Conjugué avec préconditionnement multigrille. Notons que la division par la masse volumique introduit une matrice à coefficients non constant, rendant la résolution du système plus hardue (mauvais conditionnement). De plus, la méthode Ghost Fluid est utilisée pour imposer le saut de masse volumique à l'interface, qui peut dépasser un ratio de 1000. Enfin, la pression obtenue par le solveur de Poisson est utilisée pour obtenir la vitesse à l'instant suivant :

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \frac{\nabla p^{n+1}}{\rho} \Delta t \quad (2.5)$$

Cette méthode de projection nous donne un champ de vitesse à l'instant $n + 1$ à divergence nulle.

2.2.1.b Suivi d'interface

Les méthodes Level Set utilisent une fonction continue pour décrire l'interface, et l'une des propriétés de cette fonction est de représenter la distance entre n'importe quel point dans le domaine et l'interface. De plus, l'isocontour zéro correspond à la

position de l'interface. La Level Set est utilisée dans le code ARCHER conjointement avec la méthode VOF. Elle obéit à une équation de convection :

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla G = 0 \quad (2.6)$$

Cette équation est de type hyperbolique, et sa discrétisation doit être robuste et précise. Lorsqu'elle est couplée à la méthode VOF, nous utilisons les mêmes schémas numériques pour les deux méthodes : un opérateur d'advection conservatif "splitté" de second ordre (détaillé dans l'article de Sussman and Puckett [31]). Le vecteur normal unitaire est calculé à partir de la fonction Level Set :

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla G}{|\nabla G|}, \quad \kappa(G) = \nabla \cdot \mathbf{n} \quad (2.7)$$

La méthode Level Set n'est plus une fonction distance lorsque l'on résout l'équation (2.6), à cause des gradients de vitesse. Un algorithme de redistance est nécessaire [21] pour maintenir G comme une fonction distance. Cependant l'opération de redistance peut induire des pertes de masse dans les régions sous résolues du calcul. C'est pourquoi cette méthode est couplée avec la méthode VOF. L'intérêt principal du couplage est de bénéficier de la description fine des propriétés géométriques de l'interface donné par la Level Set et des propriétés de conservation inhérentes à la méthode VOF.

Nous appelons fraction volumique de liquide ϕ le scalaire employé dans la méthode VOF. Ce scalaire représente le volume de liquide V_{lc} occupé dans la cellule considérée : $\phi = \frac{V_{lc}}{V_c}$ où V_c est le volume de la cellule. Ce scalaire est régi par une équation de transport :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = 0 \quad (2.8)$$

Une reconstruction de type PLIC est utilisée, c'est à dire que l'interface est représentée par des plans dans chaque cellule du domaine. La position de l'interface dans chaque cellule est légèrement modifiée (suivant la normale) pour que le volume contenu dans une cellule correspond au volume donné par la méthode VOF, cette correction améliore grandement la conservation de la masse. Les caractéristiques géométriques sont déterminées par la Level Set grâce aux relations détaillées dans l'équation (2.7).

Enfin, les discontinuités nécessitent un soin particulier. En général, on emploie le terme de "conditions de saut" lorsque l'on a une brusque discontinuité d'une variable. Dans le cas d'un écoulement diphasique air/eau par exemple, on a un saut de masse volumique de l'ordre de 1000 lorsque l'on "traverse" l'interface. Ces conditions de saut apparaissent car nous résolvons un formalisme "One Fluid", c'est à dire qu'un seul jeu

d'équation est résolu pour l'ensemble du domaine. De ce fait, lors de la résolution des équations nous sommes amenés à estimer des dérivées proche interface. Si une dérivée dans le domaine gazeux nécessite des points dans le liquide, les conditions de saut vont rentrer en jeu pour que les points utilisés prennent en compte le saut de masse volumique par exemple. Nous détaillerons les conditions de saut pour une variable A de cette manière : $[A] = A_{liq} - A_{gaz}$.

Dans le cas d'une interface inerte (sans changement de phase), plusieurs conditions de saut apparaissent : un saut de pression $[p]$ dû aux forces de tension de surface : $[p] = \sigma\kappa + 2[\mu](\nabla\mathbf{U}\cdot\mathbf{n})\cdot\mathbf{n}$. Ainsi qu'un saut des propriétés physiques à l'interface (masse volumique $[\rho]$, viscosité $[\mu]$).

Pour les prendre en compte, la méthode Ghost Fluid est utilisée [42]. Le principe consiste à prolonger par continuité la variable considérée, plutôt que de lui faire subir une brusque discontinuité, ce qui aurait pour effet de rendre les schémas numériques instables et/ou oscillants. Une illustration de la méthode est présentée en Figure 2.1.

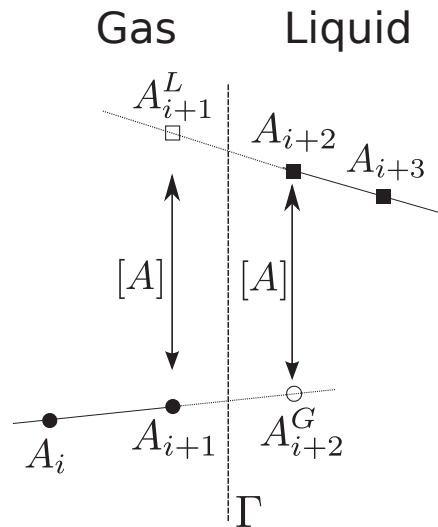


FIGURE 2.1 – Illustration de la méthode Ghost Fluid pour une variable A . ● : points dans le gaz, ■ : points dans le liquide. ○, □ : points ghost gaz et liquide respectivement. Γ représente l'interface liquide-gaz.

Le schéma numérique reste inchangé mais la condition de saut est directement intégrée dans les cellules "Ghost" de la variable étudiée (bien entendu uniquement proche de l'interface). Nous reviendrons en détail sur cette méthode dans le chapitre 5, où nous avons rajouté de nombreuses conditions de saut pour prendre en compte l'évaporation. A noter que la résolution de l'équation de poisson (2.4) présente une discontinuité, par conséquent la méthode Ghost Fluid est également employée pour la

résolution du système (Voir [76, 23] pour plus de détails).

2.2.1.c Méthode de forçage

Dans cette configuration, la turbulence est entretenue par une méthode de forçage. Cela est possible grâce au terme source f dans l'équation (2.1), qui produit un forçage linéaire (initialement développé par Rosales et Meneveau en monophasique [77]). Nous introduisons ici le même type de forçage, mais avec deux phases différentes. Ce terme $f = Au'$ où A est le coefficient de forçage, u' représente les fluctuations de vitesses. Dans ce chapitre, $\overline{(\cdot)}$ représente une moyenne volumique. Une décomposition de Reynolds est appliqué au champs de vitesse \mathbf{U} .

L'équation d'évolution de l'énergie cinétique turbulente $k = \frac{1}{2}\overline{u'^2}$ peut être écrite de la manière suivante :

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\mathbf{u}}k) = C_k + 2Ak \quad (2.9)$$

Où C_k regroupe les contributions énergétiques typiques (c'est à dire sans forçage) pour plus de clarté et $\overline{\mathbf{u}}$ est la vitesse moyenne dans le domaine. Ce terme contient une interface liquide-gaz, il est donc complexe d'estimer directement A à partir de l'équation (2.9). Par conséquent, la procédure suivante a été employée :

Etape 1 - Estimation de C_k^{n-1} basé sur la valeur de la constante A^{n-1} :

$$C_k^{n-1} = \frac{k^n - k^{n-1}}{\Delta t} - 2A^{n-1}k^{n-1} \quad (2.10)$$

Etape 2 - Calcul du coefficient de forçage A^n basé sur C_k^{n-1} :

$$2A^n k^n = \frac{k_c - k^n}{\tau_f} - C_k^{n-1} \quad (2.11)$$

Où k_c est le niveau d'énergie cinétique choisie au préalable, τ_f est un temps caractéristique de relaxation ($\tau_f = 3\Delta t$ dans l'ensemble du manuscrit) pour éviter un terme de forçage trop brusque. Par conséquent, le coefficient de forçage A est calculé à chaque pas de temps pour introduire le terme f dans les équations de Navier-Stokes (2.1). Cette méthode maintient une énergie cinétique moyenne temporellement constante.

Cependant ce type de forçage possède quelques inconvénients : l'énergie est ajoutée à toutes les échelles de turbulence, contrairement au forçage spectral (utilisé fréquemment en monophasique) où le terme de forçage est appliquée uniquement à une gamme de nombre d'onde choisie. Mais l'application d'un forçage spectral en DNS diphasique est complexe à cause des discontinuités à travers l'interface, il est aussi plus coûteux

en temps de calcul (utilisation d'un algorithme de transformée de Fourier rapide). Le choix d'un forçage linéaire a été fait pour sa simplicité et par au manque d'études dédiés aux méthodes de forçage en DNS diphasique. Une meilleure méthode de forçage, de préférence dans l'espace physique, serait une amélioration majeure à envisager.

2.2.2 Configuration numérique

La configuration étudiée est une THI diphasique forcée dans un domaine 3D cubique. Les conditions limites sont périodiques sur toutes les frontières. Un schéma représentant la configuration est présentée en Figure 2.2. La quantité de liquide initiale est définie par la fraction volumique de liquide ϕ , qu'il est possible de la faire varier de 0 à 100 %. Cela permet d'étudier aussi bien des cas monophasiques, que le régime des gouttes ou le régime des bulles.

Les paramètres physiques sont résumés dans le tableau 2.1. Ceux-ci ont été choisis pour résoudre correctement le cas monophasique au minimum, nous reviendrons sur ce point dans les sections suivantes. Les nombres adimensionnels correspondant à cette configuration sont : nombre de Weber gazeux $We_g = \rho_g \bar{k} L / \sigma = 1$, nombre de Weber liquide $We_l = \rho_l \bar{k} L / \sigma = 30$, nombre de Reynolds basé sur le liquide $Re_l = \sqrt{\frac{2}{3}} \bar{k} L / \nu_l = 310$, nombre d'Ohnesorge liquide $Oh_l = \sqrt{We_l} / Re_l = 1.77 \cdot 10^{-2}$. Où \bar{k} est l'énergie cinétique turbulente moyenne (en général égal à k_c) et L la longueur de la boîte. Les maillages utilisés sont 128^3 et 256^3 . τ_t est le temps caractéristique de retournement d'un tourbillon : $\tau_t = \frac{\bar{k}}{\epsilon}$. Dans la suite du manuscrit, t^* est le temps adimensionné par τ_t : $t^* = \frac{t}{\tau_t}$

TABLE 2.1 – Paramètres des simulations (unité S.I.)

ρ_l / ρ_g	σ	μ_g	μ_l	k_c	L	$\bar{\phi}$	τ_t
30	0.0135	$1.879 \cdot 10^{-5}$	$5.65 \cdot 10^{-4}$	3.6	$1.5 \cdot 10^{-4}$	de 0 à 100%	$2.65 \cdot 10^{-5}$

2.3 Validation monophasique

Pour évaluer le potentiel de la DNS diphasique et extraire des informations sur les interactions turbulence/interface, la première étape est de valider le code ARCHER dans une configuration THI monophasique standard.

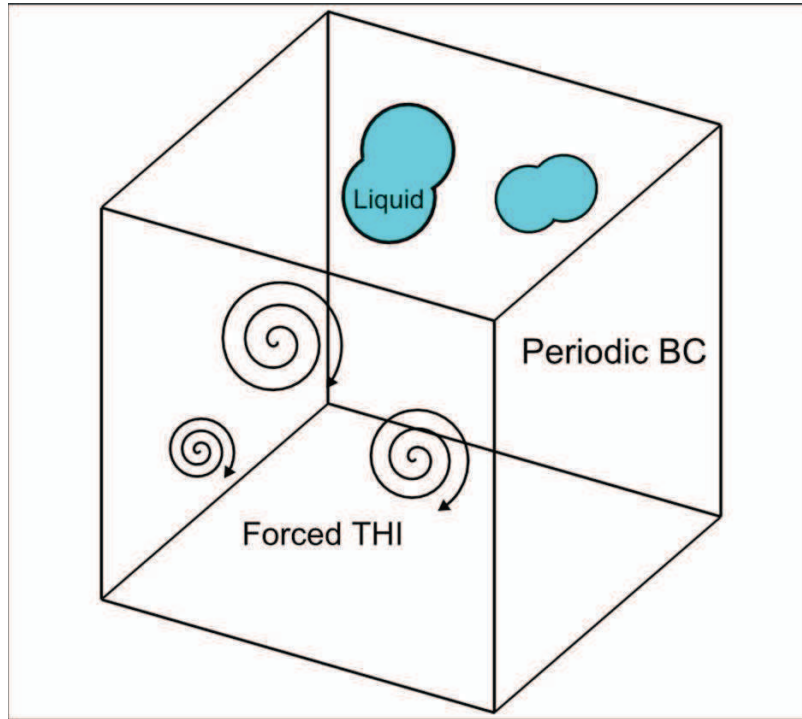


FIGURE 2.2 – Schéma représentant la configuration numérique étudiée (THID).

2.3.1 Forçage

Comme nous l'avons indiqué précédemment, la méthode de forçage utilisée ici est légèrement différente de celle de Rosales et Meneveau [77]. De plus, les schémas numériques utilisés dans les travaux de Rosales et Meneveau sont des schémas différences finies d'ordre élevés comparés à des méthodes spectrales. Alors que, dans notre cas, nous utilisons un schéma WENO d'ordre 5. Pour valider cette méthode de forçage et estimer sa précision, une comparaison entre notre implémentation et une des configurations (cas 1a) utilisées dans le papier de Rosales et Meneveau a été réalisée.

Le coefficient A de forçage est imposé pour être identique à celui utilisé dans le papier précité. Les résultats sont présentés en Figure 2.3. L'énergie cinétique turbulente converge vers une valeur qui est en accord avec les travaux de Rosales et Meneveau. Nous avons uniquement représenté la moyenne convergée de k obtenue par Rosales et Meneveau sur la Figure 2.3, mais il est important de préciser que la moyenne de k reste bruitée dans l'article original. Nous retrouvons également ce phénomène dans notre cas. Ce résultat confirme le potentiel du code ARCHER et de la méthode utilisée

pour reproduire avec précision l'équilibre entre production de turbulence (forçage) et dissipation.

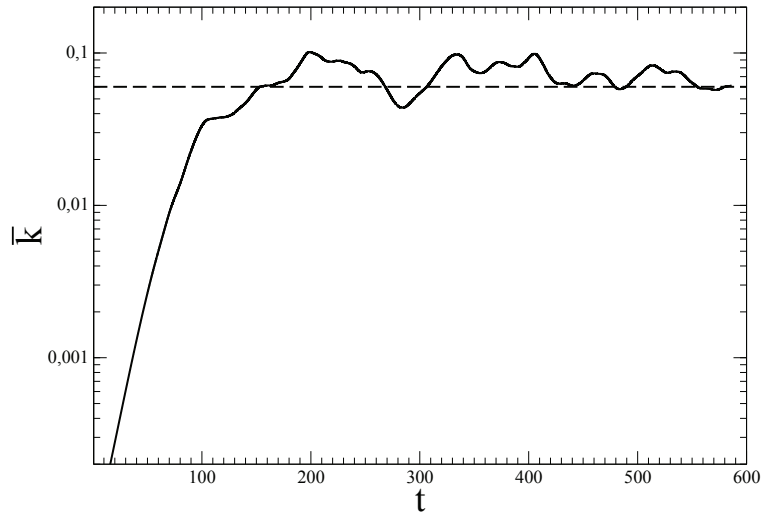


FIGURE 2.3 – Comparaison entre le code ARCHER et les résultats issus de l'article de Rosales et Meneveau [77] pour la configuration 1a. Trait plein : code ARCHER, trait pointillé : moyenne convergée de k obtenue dans l'article.

2.3.2 Echelles de turbulence et dissipation

L'estimation de l'échelle de Kolmogorov peut se faire de différentes manières :

- En la calculant a priori
- En la calculant a posteriori à partir de la définition de la dissipation
- En la calculant a posteriori à partir des fonctions de structures

Nous allons maintenant comparer ces différentes approches entre elles. Le calcul a priori de l'échelle de Kolmogorov est le plus utilisé :

$$\eta \simeq \frac{l_{int}}{Re^{3/4}}, Re = \frac{l_{int} u'}{\nu} \quad (2.12)$$

l_{int} est l'échelle intégrale, correspondant à l'échelle des plus grands tourbillons. Il reste à l'estimer. En général, on suppose que l'échelle intégrale dans notre configuration est de l'ordre de $L/2$. Ce qui nous donne : $Re = 155$, $\eta = 1.707 \mu m$. On peut remonter à

46 Validation et analyse d'un écoulement Turbulent Homogène Isotrope diphasique

la dissipation d'après la théorie de Kolmogorov avec la formule suivante : $\eta = \left(\frac{\nu^3}{\bar{\varepsilon}}\right)^{1/4}$. On obtient $\bar{\varepsilon} = 49700 \text{ m}^2 \text{ s}^{-3}$.

On peut également utiliser le calcul de la dissipation directement par sa formule mathématique selon Kolmogorov :

$$\bar{\varepsilon} = \frac{\nu}{2} \overline{\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)^2} \quad (2.13)$$

La Figure 2.4 montre l'évolution temporelle de la moyenne spatiale de la dissipation monophasique. Si on moyenne également en temps, on obtient $\langle \bar{\varepsilon} \rangle = 136000 \text{ m}^2 \text{ s}^{-3}$ et $\eta = 1.33 \mu\text{m}$.

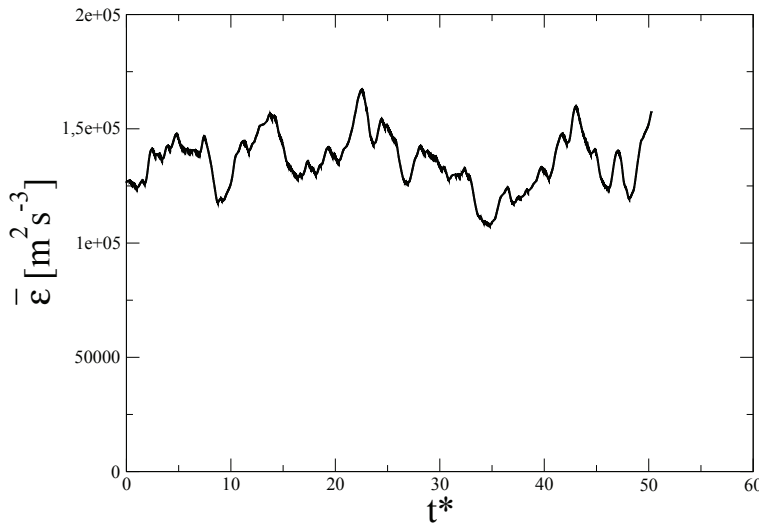


FIGURE 2.4 – Calcul de la dissipation au cours du temps à partir de l'équation (2.13).

Cette approche est plus rigoureuse que le calcul a priori, mais elle nécessite l'estimation des gradients de vitesses pendant le calcul. De plus, il est difficile de paramétrer notre configuration avec cette méthode, car il faut déjà avoir réalisé un calcul convergé pour avoir une estimation de η .

Il est possible d'obtenir $\bar{\varepsilon}$ en l'estimant à partir des fonction de structures d'ordre 2 :

$$\bar{\varepsilon} = 15\nu \frac{\Delta u^2}{r^2} \quad (2.14)$$

Cette relation est valable lorsque $\lim r^2 \rightarrow 0$ et en supposant une isotropie locale. La démonstration et la pertinence de cette relation sont discutées dans l'article de Danaila

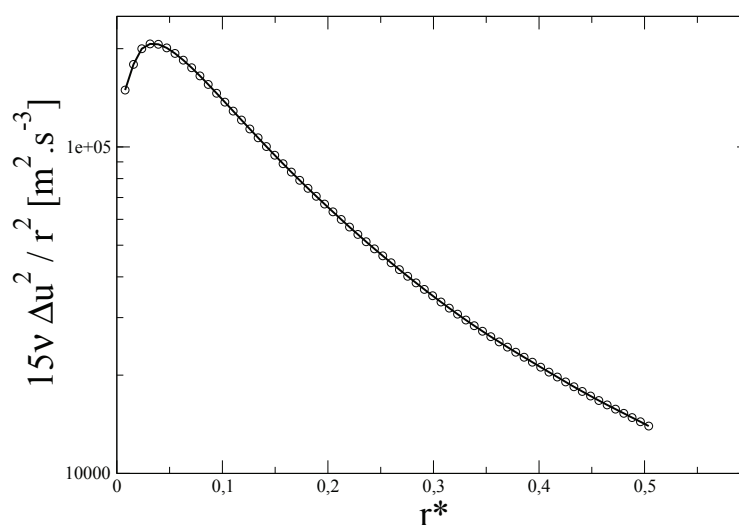


FIGURE 2.5 – Estimation de la dissipation à partir des fonctions de structures, r^* correspond à la distance entre deux points de vitesse, adimensionné par la longueur du domaine.

et al [78]. Les fonctions de structures sont calculées à partir de leur définition classique : $\Delta u^n = (u_{x+r} - u_r)^n$. r étant la distance entre deux points de vitesse, Δu^n est la fonction de structure d'ordre n . Les fonctions de structure peuvent être longitudinales ou perpendiculaires suivant l'axe de balayage. Dans cette figure nous utilisons les fonctions de structure longitudinales calculées dans l'ensemble du domaine, sur un très grand nombre d'échantillons. L'avantage principal des fonctions de structure est de rester dans l'espace physique.

Un exemple est présenté Figure 2.5. Le plateau indique la valeur de la dissipation : on obtient $\bar{\varepsilon} = 200000 m^2 s^{-3}$ et $\eta = 1.205 \mu m$.

Si on récapitule, on remarque que les valeurs obtenues pour $\bar{\varepsilon}$ et η sont différentes selon la méthode utilisée. Les écarts peuvent être très importants, en particulier lorsque l'on utilise la méthode a priori. Celle-ci nous semble inadaptée pour estimer précisément η . Elle est cependant un bon point de départ pour estimer la taille de maille si on souhaite initier une nouvelle configuration, mais des vérifications a posteriori sont nécessaires pour s'assurer que la résolution utilisée est suffisante. La méthode utilisant les gradients de vitesse et les fonctions de structure donne des résultats du même ordre de grandeur. Elle est cependant difficile à estimer car ce sont des données uniquement accessibles a posteriori et il est nécessaire d'avoir un grand nombre d'échantillons pour obtenir une valeur statistiquement convergée.

Les fonctions de structures sont très lourdes à calculer car la distance r utilisée doit balayer l'ensemble des échelles de l'écoulement. C'est à dire que pour calculer une fonction de structure en un point donné, il faut récupérer un second point pouvant être éloigné de dx à L la longueur du domaine. Cela rend la parallélisation peu efficace. De plus, elles doivent être calculées sur un grand nombre de points pour obtenir une convergence statistique. En résumé, le coût de calcul des fonctions de structure est conséquent et le calcul en lui-même est difficilement parallélisable.

C'est pourquoi nous avons choisi d'utiliser la formule utilisant les gradients de vitesse. Celle-ci est facilement parallélisable et peut par conséquent être calculée directement durant le calcul à chaque pas de temps. De ce fait, nous pouvons avoir une moyenne de la dissipation suffisamment convergée si le calcul est suffisamment long. Ensuite nous pouvons calculer η qui nous sert de critère pour connaître la taille minimum de maille requise pour la résolution de la turbulence.

TABLE 2.2 – Estimation de $\bar{\epsilon}$ et η selon différents méthodes.

Méthode	$\bar{\epsilon} (m^2.s^{-3})$	$\eta (\mu m)$
Echelle intégrale	49700	1.707
Gradient de vitesse	136000	1.33
Fonction de structure	200000	1.205

Avec la dissipation, il est également possible d'obtenir l'échelle de Taylor λ_t , qui correspond à une échelle intermédiaire entre la macro-échelle (l_{int}) et la micro-échelle (η) de turbulence. L'échelle de Taylor représente l'échelle caractéristique des fluctuations spatiales les plus fines de la vitesse. Le nombre de Reynolds basé sur λ_t est très utilisé pour caractériser un écoulement turbulent. En général, on admet qu'un écoulement est turbulent lorsque son $Re_{\lambda_t} > 10$ [17]. Pour donner un ordre d'idée, la plus fine résolution utilisée pour une THI monophasique (4096^3) concerne un écoulement turbulent à $Re_{\lambda_t} \sim 1200$ [79]. Re_{λ_t} est aussi appelé nombre de Reynolds turbulent dans la littérature.

$$\lambda_t = \sqrt{\frac{15\nu u'}{\epsilon}}, Re_{\lambda_t} = \frac{\lambda_t u'}{\nu} \tag{2.15}$$

Dans notre configuration, on obtient $Re_{\lambda_t} \simeq 25$, ce qui représente un écoulement faiblement turbulent. Cependant, c'est le maximum possible pour résoudre de façon satisfaisante notre configuration THI avec un maillage de 128^3 et un schéma numérique dissipatif.

2.3.3 Comparaison entre deux codes DNS

La validation de cette configuration n'est pas triviale car nous n'utilisons pas les schémas standard pour résoudre l'écoulement turbulent. En général, des schémas centrés d'ordre élevé ou des méthodes spectrales sont utilisés et permettent d'obtenir une bonne précision ([80] par exemple). Dans ce contexte, le critère de résolution pour considérer qu'une simulation est une DNS est le ratio entre la taille de la maille et l'échelle de Kolmogorov. Plus précisément, $1.5 \leq k_{max}\eta$ est considéré comme le critère de référence dans la communauté de la turbulence. Où k_{max} est le plus grand nombre d'onde, correspondant dans l'espace physique à dx . Il est important de rappeler que ce critère a été retenu après de nombreuses DNS, mais n'a pas été calculé théoriquement. Cependant, ces méthodes ne sont pas capable de prendre en compte des discontinuités et les schémas numériques utilisés sont dispersifs. Par conséquent, ils peuvent devenir instables lors d'important gradient de vitesse par exemple.

Au contraire, les schémas de type WENO sont capable de résoudre les forts gradients de vitesse présents à l'interface liquide-gaz. Cependant ces schémas souffrent d'une précision moins élevée et peuvent introduire une dissipation numérique à petite échelle, qui doit être prise en compte lorsque l'on étudie la turbulence. Le schéma WENO d'ordre 5 est utilisé car il représente un bon compromis entre robustesse et précision.

Par conséquent, malgré la dissipation numérique introduite par le schéma, l'objectif est d'obtenir une précision optimale à toutes les échelles, comme une DNS monophasique, mais avec un schéma dissipatif. Pour s'assurer que notre résolution est suffisante pour résoudre la turbulence, une comparaison entre le code ARCHER et un code DNS monophasique utilisé dans de nombreuses études DNS (ASPHODELE [81, 57, 56, 82]) a été menée. Ce code utilise un schéma centré d'ordre 4 pour les dérivées spatiales et un Runge Kutta d'ordre 3 pour l'intégration temporelle. Une analyse des deux paramètres clés de la turbulence (\bar{k} et $\bar{\varepsilon}$) dans une THI décroissante a été réalisée, et présentée en Figure 2.6. La condition initiale est issue d'un calcul convergé d'une THI monophasique forcée dans le code ARCHER. Les paramètres physiques sont les mêmes que ceux présentés dans le tableau (2.1). Le maillage utilisé est 128^3 , le rapport $\frac{\eta}{dx} = 1.14$. Moins d'1% de différence a été observé au maximum, cela signifie que les valeurs moyennes de la dissipation et de l'énergie cinétique sont bien capturées par le code ARCHER.

D'autre part, cette comparaison est très utile pour paramétrer la configuration DNS. En effet, l'utilisation de schéma dispersifs permet de constater rapidement si la turbulence est résolue : le calcul diverge très rapidement si la turbulence est sous résolue. Ce qui n'est pas le cas du WENO, qui est capable de résoudre une THI à des nom-

bres de Reynolds très élevé sans avoir un maillage suffisant pour résoudre l'échelle de Kolmogorov. Dans ce cas précis, la dissipation numérique est dominante et le spectre d'énergie cinétique est contrôlé par cette dissipation, et non par la dissipation physique "réelle". De plus, la convergence en maillage est impossible car la dissipation numérique dépend du maillage utilisé. C'est un point très important à prendre en compte lorsque l'on étudie la turbulence avec un schéma dissipatif.

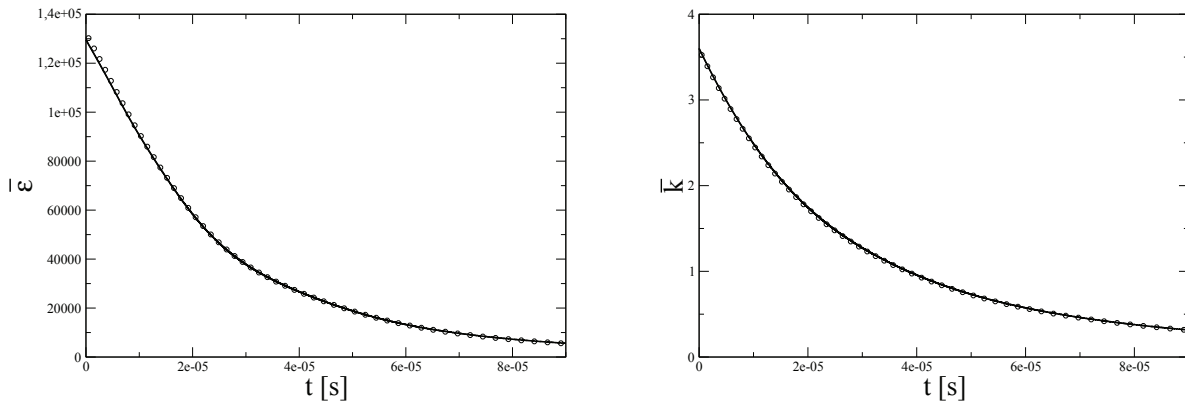


FIGURE 2.6 – Comparaisons ARCHER/ASPHODELE. A droite : $\bar{\epsilon}$. A gauche $\bar{\omega}$. Trait plein : code ASPHODELE, \circ : code ARCHER

2.3.4 Convergence en maillage

Une étude de convergence en maillage a été réalisée, en se basant sur le spectre d'énergie turbulente. Le spectre nous permet d'analyser le phénomène de dissipation numérique et nous donne des informations sur les échelles turbulentes. Il est obtenu à l'aide de la librairie FFTW. Dans ce contexte, nous avons comparé une résolution 128^3 ($\frac{\eta}{dx} = 1.14$) et 256^3 ($\frac{\eta}{dx} = 2.28$), avec les mêmes paramètres physiques que précédemment. La comparaison est montré Figure 2.7.

On remarque que le spectre est similaire pour une large gamme d'échelle, mais que les petites échelles sont légèrement affectées par la dissipation numérique. Cela confirme nos craintes concernant l'effet du WENO à petite échelle. Cependant, la majeure partie du spectre est inchangée, indiquant que la majorité des échelles sont bien résolues en 128^3 . On remarque également que le cas 256^3 est trop résolu, le plateau présent à haut nombre d'onde semble être du bruit purement numérique. Les calculs 256^3 étant très coûteux si l'on veut réaliser des moyennes d'ensemble et faire varier une large gamme de paramètres (notamment la fraction de liquide ϕ de 1 à 99%), nous

nous sommes limités à un maillage 128^3 dans la majorité des cas étudiés. De plus, nous nous intéressons principalement aux statistiques des quantités interfaciales et turbulentes. Celles-ci sont, nous le verrons dans les prochaines sections, peu affectées par les différents maillages utilisés.

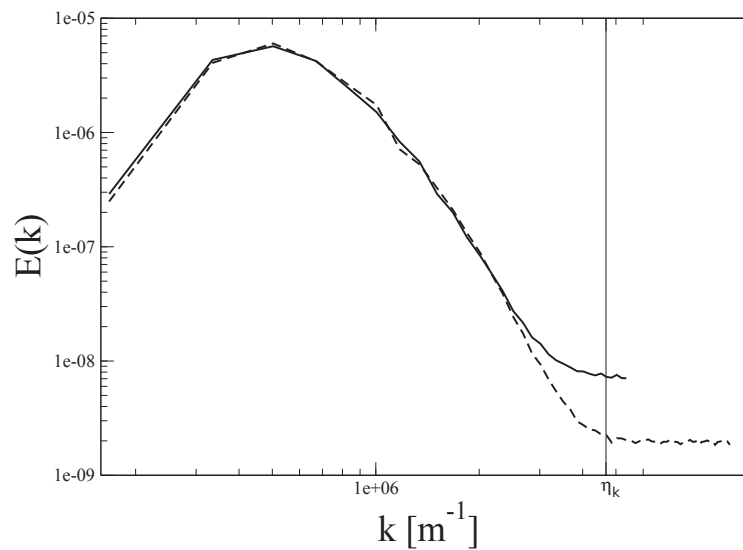


FIGURE 2.7 – Spectres d'énergie cinétique turbulente en monophasique. Trait plein : 128^3 , tirets : 256^3 . η_k représente l'échelle de Kolmogorov dans l'espace spectral.

2.3.5 Conclusion

Nous avons validé intensivement notre configuration pour s'assurer une résolution suffisante de la turbulence. Cela a mis en avant les difficultés rencontrées lorsque l'on utilise un schéma convectif dissipatif pour retrouver les résultats attendus en configuration THI monophasique. Obtenir les paramètres physiques d'une telle configuration n'est pas immédiat et requiert de nombreuses validation comme l'analyse du spectre d'énergie cinétique turbulente, des fonctions de structures et la vérification de nos résultats avec un code de référence. Cependant, rien n'indique que ces paramètres physiques suffisent à résoudre la THI en configuration diphasique. Nous abordons ce point dans la section suivante.

2.4 Analyse de la THI diphasique

2.4.1 Configuration

La configuration utilisée est strictement identique au cas monophasique, exceptée l'introduction de liquide au sein de la boîte. L'ajout de l'aspect diphasique va impliquer un nombre sans dimension : le nombre de Weber, correspondant au ratio entre les forces d'inertie et les forces de tension de surface. Un nombre de Weber trop élevé est problématique car il favorise la rupture de structures liquides, ce qui peut éventuellement introduire une perte de masse si la taille de cette structure devient plus petite que dx . Ce nombre de Weber étant directement lié à l'énergie cinétique ($We = \frac{\rho u^2 L}{\sigma}$), il faut trouver le couple $k - We$ adéquat pour rester dans le régime d'atomisation, tout en restant conservatif en masse et suffisamment résolu pour capturer l'échelle de Kolmogorov.

A priori, ce couple est très difficile à obtenir. Nous avons choisi de définir les paramètres turbulents dans un premier temps à l'aide la configuration monophasique. Puis, nous avons choisi la tension de surface σ pour conserver un nombre de Weber assez élevé pour rester dans le régime de l'atomisation. Nous avons réalisé de nombreuses simulations pour étudier a posteriori les résultats, en surveillant : la perte de masse, le comportement global de l'interface et les propriétés de la turbulence.

Dans nos calculs, cette perte de masse est quantifiée et toujours inférieure à 0.1% (par rapport à la masse initiale). Le comportement global de l'interface nous indique si nous sommes dans le régime de l'atomisation. Les propriétés de la turbulence sont difficiles à aborder. A notre connaissance, il n'y a pas ou peu d'étude qui considère une THI diphasique il est donc difficile de se ramener aux travaux de Kolmogorov par exemple, qui décrit une échelle de Kolmogorov et une dissipation turbulente. On peut néanmoins utiliser les formules classiques de la turbulence pour obtenir un ordre d'idée de l'échelle de Kolmogorov dans une THID. Nous avons pris soin d'avoir une viscosité cinématique identique dans les deux phases pour pouvoir calculer η , mais aucune base théorique ne nous indique la justesse de cette approche. Nous reviendrons sur ce point dans les sections suivantes.

2.4.2 Comportement de l'interface

Dans la configuration THID, on note de très fortes interactions entre structures liquides : elles vont rentrer fréquemment en collision et peuvent éventuellement coalescer. Les structures liquides peuvent prendre des formes très différentes (voir Figure

2.8), on observe des gouttes mais aussi des ligaments, ou encore des grosses structure liquides de forme quelconque. C'est le comportement souhaité car nous avons choisi d'étudier un régime d'atomisation. Il est également possible de faire varier ϕ pour étudier des cas très denses à des cas plus dispersés.

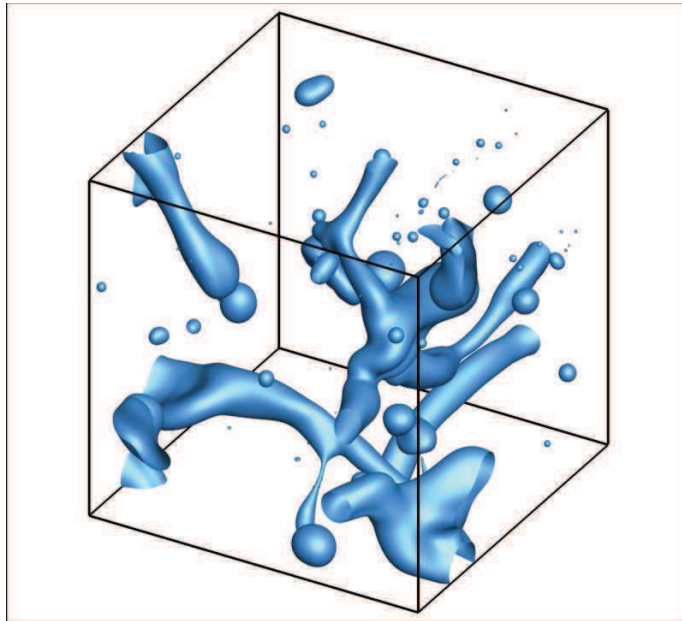


FIGURE 2.8 – Représentation de l'interface au sein d'une THI diphasique pour $\phi = 5\%$.

Une variable intéressante est la densité d'interface Σ (quantité de surface), qui est directement extraite de la méthode CLSVOF. On remarque dans la Figure 2.9, que $\bar{\Sigma}$ varie en fonction des événements tels que la coalescence et la rupture des structures liquides. Le phénomène de coalescence va réduire $\bar{\Sigma}$, alors qu'un phénomène de rupture va augmenter $\bar{\Sigma}$. Malgré le bruit introduit par les déformations de l'interface, on remarque qu'on obtient une valeur moyenne convergée de la densité d'interface : $\langle \bar{\Sigma} \rangle = 13030 \text{ m}^{-1}$ comme on peut le voir sur la Figure 2.9. Cette variable est de première importance lorsqu'on s'intéresse au modèle ELSA, nous reviendrons sur cet aspect dans le chapitre suivant.

2.4.3 Influence du diphasique sur la turbulence

Comme nous l'avons mentionné précédemment, il est très difficile d'évaluer l'influence de l'écoulement diphasique sur la turbulence. Cependant il est possible d'utiliser les outils standard dédiés à la turbulence monophasique. Tout d'abord, nous

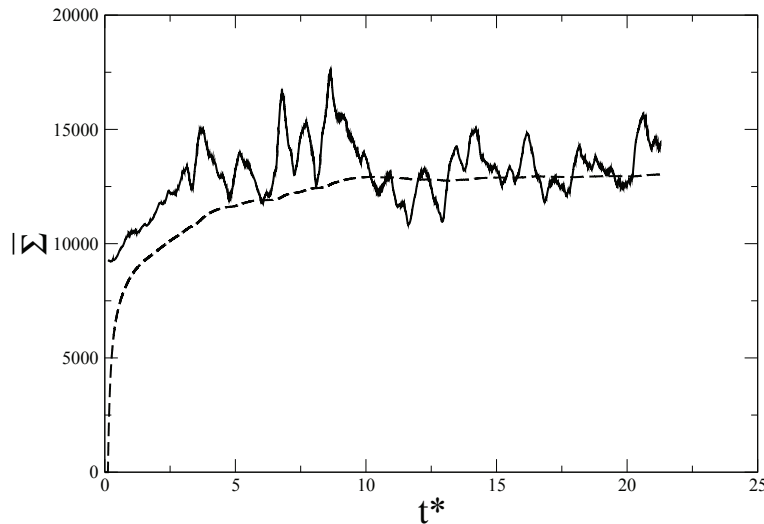


FIGURE 2.9 – Trait plein : évolution temporelle de la densité d'interface moyenne $\bar{\Sigma}$. Trait pointillé : moyenne temporelle glissée $\langle \bar{\Sigma} \rangle = \int \frac{1}{T} \bar{\Sigma} dt$. t^* est le temps adimensionné par τt , comme dans la section précédente.

avons étudié les spectres d'énergie cinétique turbulente pour observer les différences de répartition d'énergie cinétique en monophasique et en diphasique. Il est possible de calculer le spectre dans les deux phases car la vitesse est continue à l'interface.

On remarque dans la Figure 2.10, que l'ajout de structures liquides influence le spectre principalement à petite échelle. Ce qui est assez cohérent car la présence de structures liquides peut être comparé à des obstacles dans l'écoulement gazeux, ce qui induit des sillages et une trainée derrière chacune des structures. Cette observation met également en avant la difficulté de résoudre de façon DNS un écoulement diphasique turbulent. En effet, il est impossible de résoudre le sillage apparaissant derrière chaque structure car en régime d'atomisation nous sommes en présence de structures liquides de quelques dx . De plus, si on essaye de raffiner le maillage, de nouvelles structures peuvent apparaître et créent de nouveaux sillages encore plus petits et difficiles à résoudre.

Ces sillages sont très marqués lorsque l'on analyse les champs 3D de dissipation turbulente (voir Figure 2.11). Des effets de sillage sont clairement visibles : on voit une dissipation importante derrière les structures liquides. Cela conforte le comportement visible sur les spectres d'énergie cinétique à petite échelle. On note également une très forte dissipation proche de l'interface. Celle-ci est liée aux forts gradients de vitesse

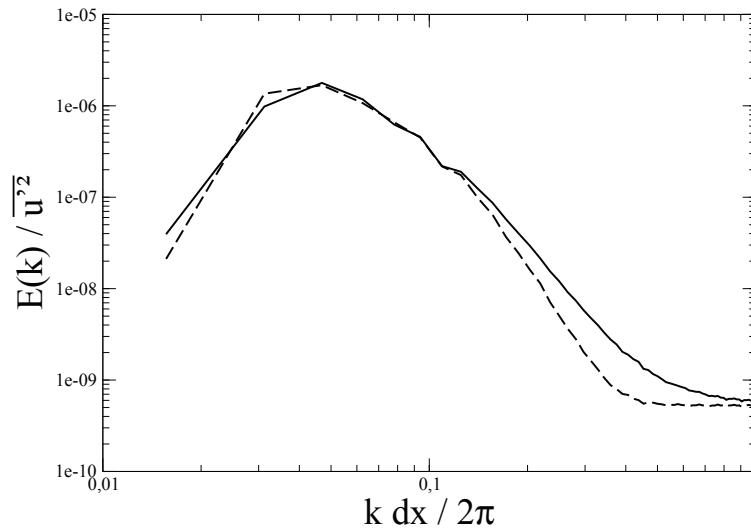


FIGURE 2.10 – Spectres d'énergie cinétique turbulente adimensionnés. Trait pointillé : monophasique, trait plein : $\phi = 5\%$.

présents à l'interface liquide-gaz.

On peut affiner l'analyse de la dissipation en réalisant un nuage de point représentatif de la dissipation en fonction de la Level Set (voir Figure 2.11). On remarque que plus on s'approche de l'interface, plus la dissipation est forte.

Enfin on peut comparer la dissipation moyenne dans le cas monophasique et diphasique (voir Figure 2.12). On retrouve le même comportement que les analyses précédentes : la dissipation est fortement augmentée par la présence de liquide. Si on applique l'opérateur de moyenne temporelle, on obtient $\langle \bar{\epsilon} \rangle = 136000 m^2 s^{-3}$ pour le cas monophasique et $\langle \bar{\epsilon} \rangle = 226483 m^2 s^{-3}$ pour le cas diphasique. Soit une augmentation de 66%. La question de la résolution réapparaît car si la dissipation augmente, l'échelle de Kolmogorov diminue : $\eta = 1.17 \mu m$ soit $\frac{\eta}{dx} = 1$. Il est donc possible que la configuration présentée ici reste légèrement sous résolue en cas diphasique si on applique la définition stricte de η . Celle-ci peut être mise en cause car nous ne savons pas si cette échelle est pertinente dans une THID. Car, comme nous l'avons évoqué précédemment, la plus petite échelle dans un écoulement diphasique est inconnue à l'heure actuelle, donc il est très difficile de s'assurer une résolution suffisante, malgré nos efforts.

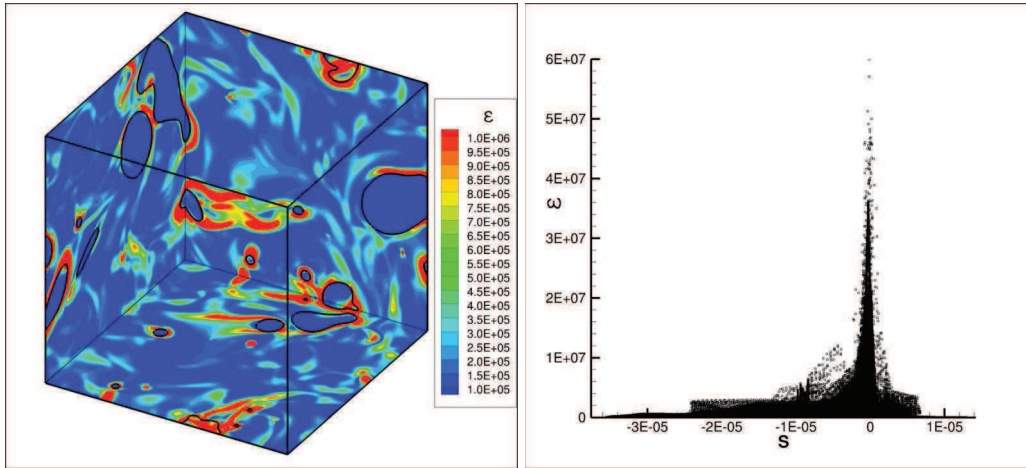


FIGURE 2.11 – A gauche : Champs de dissipation sur les frontières du domaine, l'iso-contour noire correspond à l'interface liquide-gaz (niveau zéro de Level Set). A droite : Nuage de points de la dissipation en fonction de la distance à l'interface.

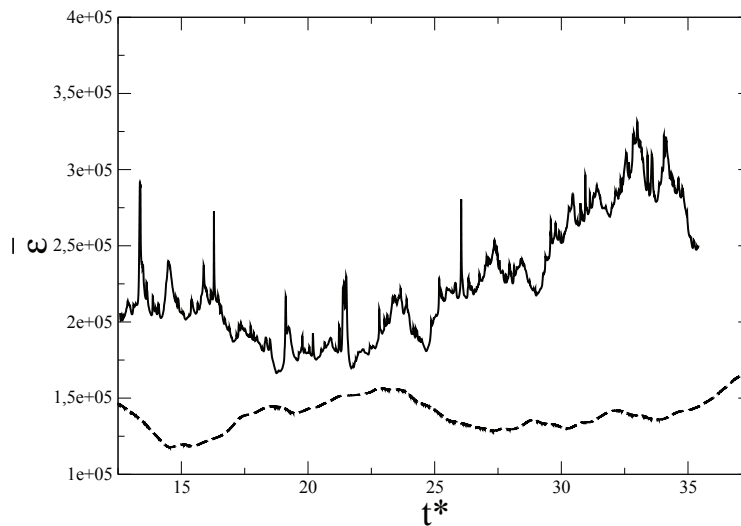


FIGURE 2.12 – Evolution temporelle de la dissipation moyenne $\bar{\epsilon}$. Trait pointillé : monophasique, trait plein : $\phi = 5\%$.

2.5 Conclusion et perspectives

Nous avons montré que réaliser une THI diphasique est difficile à mettre en oeuvre. Tout d'abord, la question de la résolution nécessaire pour capturer à la fois les phénomènes turbulents et diphasiques n'a pas de réponse immédiate. L'utilisation de schémas numériques dissipatifs introduit une dissipation supplémentaire qui doit être surveillée car elle peut altérer les résultats, même dans un écoulement purement monophasique. Nous avons noté une dissipation nettement plus importante dans le cas diphasique, avec la naissance de sillages derrière les structures liquides. Ces sillages sont une source de dissipation. La proximité de l'interface est également sujette à une dissipation importante.

Il est évident qu'il reste beaucoup de travail pour analyser finement les interactions turbulence/interface, et répondre à la question de la résolution minimum en THID. Il est regrettable que peu d'études ne s'intéressent à ce sujet, une étude approfondie d'une THID pourrait éventuellement apporter des réponses sur le critère de résolution et permettrait d'améliorer la compréhension du comportement de la turbulence lorsqu'elle rencontre une interface. Les objectifs prioritaires de cette thèse n'étant pas d'étudier la turbulence proche interface, nous n'avons pu nous intéresser en détail à ces phénomènes faute de temps.

Néanmoins, nous pensons avoir suffisamment validé cette configuration pour l'étendre à l'étude de la vaporisation et de l'atomisation. Dans tous les cas nous ferons une étude de convergence en maillage pour s'assurer que les résultats obtenus sont indépendants du maillage utilisé.

Chapitre 3

Amélioration du modèle d'atomisation primaire ELSA à l'aide de la simulation numérique directe

Dans ce chapitre, nous mettons en pratique la configuration THI diphasique pour extraire des informations importantes en modélisation de l'atomisation. Une comparaison entre les résultats obtenus en DNS et avec le modèle ELSA dans des configurations similaires est effectuée, et des améliorations sont proposées concernant la modélisation de la zone dense du spray. Ce travail a fait l'objet d'une publication dans l'International Journal of Multiphase flows [83], nous retranscrivons donc cet article dans ce chapitre.

3.1 Abstract

This study employs DNS of two-phase flows to compare and improve primary atomization models used in RANS and/or LES formalisms. The paper is based on the ELSA model, which was initially proposed in Vallet, A., Borghi, R., 1999. Modélisation eulerienne de l'atomisation d'un jet liquide. Comptes Rendus de l'Académie des Sciences - Series IIB - Mechanics-Physics-Astronomy 327 (10), 1015 – 1020. This model has been used successfully in many studies to describe the complete liquid atomization process from primary atomization to the dispersed spray. A two-phase flow homogeneous isotropic turbulence was used for the numerical configuration. A statistical analysis of the equilibrium Weber number was performed with a DNS of two-phase flows to verify the definition given by the ELSA model. This verification was carried out for various liquid volume fractions, mesh resolutions, and surface tensions. An

ensemble averaging of the time evolution of the interface density was performed to check the validity of the interface density equation used in the ELSA model. Proposed improvements of the ELSA model were compared with the reference DNS for multiple configurations. The new proposal shows good agreement with the DNS.

3.2 Introduction

Liquid fuel combustion, which continues to be a major source of energy, involves an injection phase as a critical step for mixture preparation and the subsequently induced combustion. Accordingly, many studies have been devoted to describing the injection process and its influence on vaporization and mixing. However, it is difficult to set up experiments that make it possible to study these processes, in particular close to the dense zone of the spray. Numerical methods that accurately describe the interface in two-phase flows have become available in the last decade. The most common strategies used for direct numerical simulation (DNS) of interfacial flows are the volume of fluid method [26], the level set method [20], and the front-tracking method [33]. Because discontinuities at the interface have to be treated carefully, numerical methods such as the delta function method [84] and the ghost fluid method [42] were developed. The latter made it possible to apply sharp jump conditions at the interface. Concerning atomization, recent studies have successfully described the primary atomization of liquid jets [32, 41].

Unfortunately, these simulations have shown that the finest scales of the flow are not resolved even at resolutions of 0.35 micrometers [41]. Some studies have used an adaptive mesh refinement to optimize computational costs [72, 28], but a numerical cutoff scale remains. It is possible that, in a few years, improved numerical methods and computational efficiency will enable us to solve the finest scales of two-phase flows. Furthermore, the finest scale in multiphase flows remains unknown, contrary to the Kolmogorov and the Bachelor scale in single-phase flows.

This issue indicates the necessity of subgrid models for the physics of this particular scale, similar to Large Eddy Simulation (LES) in single-phase flows. Relatively few studies have investigated LES of two-phase flows. A first approach relies on interface tracking methods to solve the interface without solving the finest scales of wrinkling ([85] for example). Another more phenomenological approach is to continuously describe the transition between the well-resolved interface and structures smaller than the cell size. This approach introduces the interface density area, which indicates the quantity of interfacial area in each cell, but without indications of the shape of the

structures [51]. In the aforementioned study, Chesnel et al. adapted the ELSA model (initially proposed by Vallet & Borghi [48]) to LES modeling, producing interesting statistical results independent of mesh size and in accordance with a reference two-phase flow.

Studies based on well-defined configurations, which allow us to solve all relevant scales of the flow, can help improve LES modeling. DNS of homogeneous isotropic turbulence (HIT) is in continued use to study turbulence characteristics and scalar mixing in single-phase flows. To characterize interface/turbulence interactions in two-phase flows, an extension of this configuration has emerged in recent DNS studies : initially, these studies used a forced HIT [70], but a freely decaying turbulent two-phase flow has also been studied [86], and vaporization was recently included [87]. Other applications have examined solid particles in an HIT [88] and downward turbulence in bubbly flows [89].

The aim of this work is to further these studies by analyzing statistical quantities extracted from a validated DNS database of two-phase flows [87] with a main focus on interfacial quantities. The obtained results provide valuable information to improve primary atomization modeling. We chose to focus on the ELSA model because it allowed us to directly address the dense zone of the spray [48, 52].

The reference DNS was based on the widely documented ARCHER code [32]. A coupled level set/VOF method was used as the interface tracking method. A sufficiently high density ratio between the two phases was chosen to simulate realistic engine conditions. Both quantitative and qualitative aspects were analyzed.

The following section first describes the constitutive equations and numerical procedures of the DNS as well as those of the model. The flow geometry is then presented along with the various prescribed parameters. Next, an appropriate definition of the equilibrium Weber number is proposed, leading to a discussion of the turbulent kinetic energy used in the Weber number. Finally, a statistical analysis of the interface density is carried out by studying the time evolution of the interface density between two equilibrium states for different configurations and liquid volume fractions. Corrections of the interface density equation are proposed and tested.

3.3 Numerical methods

3.3.1 Navier-Stokes equation

We coupled the joint level set/VOF method with a projection method to carry out the direct numerical simulation of incompressible Navier-Stokes equations :

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{V} = -\frac{\nabla p}{\rho} + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot (2\mu \mathbf{D}) + \mathbf{f} + \frac{1}{\rho} \sigma \kappa |\nabla G| \delta(G) \mathbf{n} \quad (3.1)$$

where p is the fluid pressure, \mathbf{U} is the velocity vector, μ is the dynamic viscosity, and \mathbf{D} is the viscous deformation tensor. At the interface, the surface tension force can be considered based on the Dirac function $\delta(G)$, where σ is the surface tension, \mathbf{n} is the normal unit vector, and κ is the curvature computed from the level set function G . To solve the derivatives, a fifth-order scheme, WENO 5 [75], was used for convective terms, and a second-order central finite difference scheme was chosen for diffusive terms. (See [32] for further details concerning the numerical procedure.) A forcing method was necessary to maintain the turbulent kinetic energy at a prescribed level. This was achieved through the source term \mathbf{f} , which induced linear forcing [77] and resulted in $\mathbf{f} = A\mathbf{u}'$, where A is the forcing coefficient, \mathbf{u}' represents velocity fluctuations, and $\bar{\mathbf{u}}$ is the mean flow velocity. In this work $\overline{(\cdot)}$ refers to volume averaging. A Reynolds decomposition was applied to the velocity field \mathbf{U} . The evolution equation of the turbulent kinetic energy $k = \frac{1}{2} \overline{\mathbf{u}'^2}$ may be written as follows :

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}} k) = C_k + 2Ak \quad (3.2)$$

where, for the sake of clarity, C_k regroups the typical energetic contributions (i.e. without forcing). The estimation of C_k involves a liquid-gas interface, which made it complex to estimate A directly from equation 3.2. Thus, the following two-stage procedure was set up :

Stage 1 - Estimation of C_k^{n-1} based on the A^{n-1} constant value :

$$C_k^{n-1} = \frac{k^n - k^{n-1}}{\Delta t} - 2A^{n-1}k^{n-1} \quad (3.3)$$

Stage 2 - Computation of the forcing constant A^n based on C_k^{n-1} :

$$2A^n k^n = \frac{k_c - k^n}{\tau_f} - C_k^{n-1} \quad (3.4)$$

where k_c is the chosen level of kinetic energy, and τ_f is a characteristic relaxation time ($\tau_f = 3\Delta t$ was retained in this study) to avoid a sharp forcing term. Thus, the force coefficient A was computed at each time step to introduce the forcing term \mathbf{f} in the Navier-Stokes equations.

This method maintained a statistically stationary homogeneous isotropic turbulence (HIT) in the whole domain.

3.3.2 Interface tracking method

An overview of the interface tracking method and the treatment of discontinuities is provided below. Further details can be found in the work of Menard et al. [32]. Level set methods use a continuous function to describe the interface [90, 19]. This function is defined as the signed distance between any points of the domain and the interface. The zero level curve of that function therefore provides the interface location. The convection equation to describe the motion of the interface in a given velocity field \mathbf{V} reads as follows :

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla G = 0 \quad (3.5)$$

Equation (3.5) is the hyperbolic type, and the discretization method must combine a high convergence order and robustness. Thus, for the distance function field, a 5th-order WENO scheme [75] was used for convective terms. The normal unit vector \mathbf{n} and the curvature of the interface $\kappa(G)$ were evaluated based on the level set function by

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla G}{|\nabla G|} , \quad \kappa(G) = \nabla \cdot \mathbf{n} \quad (3.6)$$

The level set method G no longer remained a distance function when solving Eq. (3.5) because of the velocity gradients. A redistancing algorithm [21] was thus applied to keep G as the signed distance to the interface. A numerical resolution of Eq. (3.5) combined with the redistancing algorithm can induce mass loss in under-resolved regions. This potential loss is the main drawback of level set methods. To improve mass conservation, extensions of the method have been proposed [31, 37, 24]. Specific experiments have been developed to evaluate some of these methods [32]. The coupled level set/volume-of-fluid method (CLSVOF, see [31]) was found to be well-adapted to capture atomization processes [32, 52]. The main concept behind the CLSVOF method is to benefit from the advantage of both level set and VOF strategies : mass loss is limited through the VOF method, and a detailed description of interface properties is retained with the level set. The level set permits the reconstruction of an accurate interface in each cell and helps in the transport of the liquid volume fraction. The location of the interface is slightly modified to retain an amount of liquid in a computational cell that corresponds to the liquid volume fraction determined by the VOF approach. This displacement is used to ensure mass conservation.

Fluid dynamics equations were solved in the context of a low Mach number approach, based on a projection method for the direct numerical simulation of incompressible Navier-Stokes equations (detailed in [23]). Density and viscosity depended

on the sign of the level set function according to each phase (liquid and gas). To finalize the description of the two-phase flow, jump conditions across the interface were taken into account with the ghost fluid (GF) method. In the GF method, ghost cells are defined on each side of the interface [91, 76]. This prolongs each phase to allow smooth derivatives in the vicinity of the interface. As defined previously, the interface was characterized through the distance function, and jump conditions were extrapolated on a few nodes on each side of the interface. Further details on implementing the GF method to solve the Poisson equation with discontinuous coefficients can be found in the literature [76, 23].

3.3.3 Numerical configuration

The solution was carried out in a three dimensional cubical domain with periodic boundaries similar to the study of Duret et al. [87]. This configuration extends previous numerical studies on mixing in single-phase flows [92] to two-phase flows.

Because of to the lack of knowledge on the smallest length scale dynamics, there is presently no consensus on the appropriate mesh resolution that should be applied when simulating liquid-gas flows. The mesh resolution used in this work is based on the mesh resolution that should be used for single-phase flow simulations to capture the Kolmogorov length scale [87]. Mesh convergence of the equilibrium Weber number can be observed in Figure 3.4.

To accurately control the various inputs of the simulation, a three-dimensional forced homogeneous turbulence of a gas/liquid flow was considered with a liquid volume fraction ϕ ranging from 5% to 95%. The liquid-gas interface is represented in Figure 3.1 to illustrate the numerical configuration for a liquid volume fraction of 5 %. To define a configuration with effective interactions between the liquid-gas interface and the turbulence, the following dimensionless parameters were retained : gaseous Weber number $We_g = \rho_g \bar{k} L / (\sigma) = 1$, liquid Weber number $We_l = \rho_l \bar{k} L / (\sigma) = 30$, liquid based Reynolds number $Re_l = \sqrt{\bar{k}} L / \nu_l = 310$, and liquid Ohnesorge number $Oh_l = \sqrt{We_l} / Re_l = 1.77 \cdot 10^{-2}$, where \bar{k} is the mean kinetic energy (usually equal to k_c), σ is the surface tension, ν is the kinematic viscosity in the appropriate phase, ρ is the density, and L is the box length.

Two mesh resolutions were studied to analyze the influence of the mesh size on results (128^3 and 256^3). Turbulence validation was not considered in this study because a validation of this configuration has been the subject of a previous paper [87] for the same configuration. The corresponding set of fluid parameters is summarized in Table 3.1.

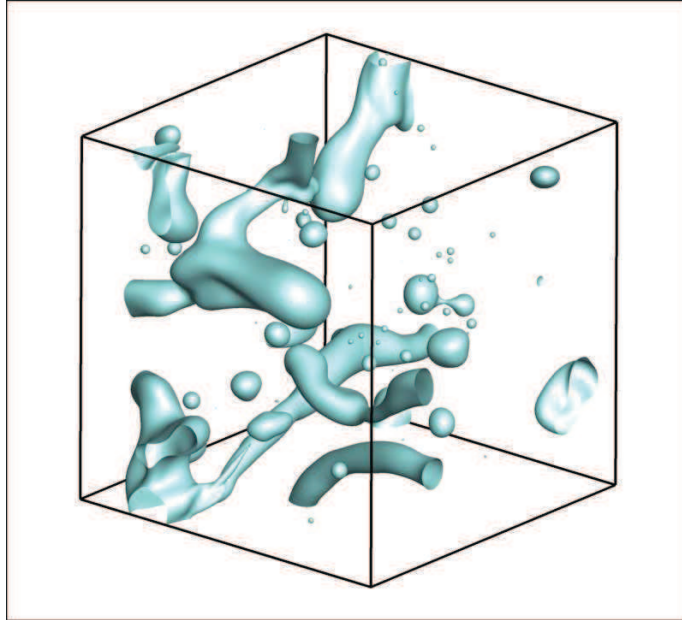
FIGURE 3.1 – Interface visualization, liquid volume fraction $\phi = 5\%$

TABLE 3.1 – Parameters of the simulation (S.I. units)

ρ_l/ρ_g	σ	μ_g	μ_l	k_c	L	$\bar{\phi}$
30	0.0135	$1.879 \cdot 10^{-5}$	$5.65 \cdot 10^{-4}$	3.6	$1.5 \cdot 10^{-4}$	1 – 5 – 10 – 50 – 90 – 95%

3.4 Primary atomization modeling

3.4.1 ELSA model overview

Few modeling strategies consider primary atomization. In this region, the flow is composed of two strongly interacting phases (gas and liquid). Dispersed methods (Lagrangian or Eulerian) are not applicable because they do not consider a realistic view of the dispersed phase (droplets or bubbles). Indeed, although spherical elements cannot be observed, a strongly wrinkled continuous interface is present. The only available approach is to use a transport equation for the liquid-gas surface, in which case the local surface density can be defined as a generalized function, and an exact equation can be derived [93]. In their study, Morel et. al also demonstrated the link between the interfacial area and the flame surface density. However, this general equation has to be closed due to averaging or filtering operations in the RANS or LES formalism.

Analogous to the flame surface density, a postulated equation for the mean interface

density was proposed by Vallet & Borghi [48]. In the first formulation of the ELSA model, which focused on the atomization regime (high Weber and Reynolds numbers), the mean interface density was defined as the area of liquid-gas surface per unit of volume ($\bar{\Sigma} = \frac{S_L}{V}$). This equation included appropriate source/sink terms to account for the effects of surface tension, vaporization, turbulence, and coalescence.

liquid-gas interface density equations have been rewritten in various ways since the first proposal (for example [94, 95, 96]). In this study, we have opted to work with the most recent interface density equation [52] :

$$\frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\Sigma} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\nu_t}{S_{c_t}} \frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial x_i} \right) + \underbrace{\Phi(S_{init} + S_{turb})}_{dense} + \underbrace{(1 - \Phi)(S_{coll/coal} + S_{2ndBU})}_{dispersed} + S_{vapo} \quad (3.7)$$

where $\bar{\Sigma}$ is the mean interface density, Φ is a repartition function used to share out dense ($\Phi = 1$) and dilute source terms ($\Phi = 0$), S_{c_t} is the turbulent Schmidt number, ν_t is the turbulent viscosity, and \tilde{u}_i is the Favre averaged mixture velocity. In the present DNS configuration (dense two-phase flows HIT, no phase change) the interface density equation is reduced :

$$\frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial t} = S_{turb} \quad (3.8)$$

The turbulence source term was modeled following Vallet & Borghi [48] and Lebas et al. [52] :

$$S_{turb} = C_{\Sigma} \frac{\bar{\Sigma}}{\tau_t} \left(1 - \frac{\bar{\Sigma}}{\bar{\Sigma}^*} \right) \quad (3.9)$$

where $\bar{\Sigma}^*$ is the "equilibrium" interface density, τ_t is a turbulent timescale, and C_{Σ} has been set to unity due to insufficient information.

This term corresponded to the production/destruction of the liquid-gas interface density, which resulted from stretching and wrinkling of the turbulent flow and the effects of collision and coalescence in the dense part of the spray. The term was assumed to be driven by a turbulent time scale τ_t . This production/destruction term was defined to attain an equilibrium value of the surface density $\bar{\Sigma}^*$. $\bar{\Sigma}^*$ corresponds to the quantity of surface that would be obtained by keeping the total mixture turbulent kinetic energy and the liquid volume fraction constant.

Usually, an equilibrium Weber number $We^* = \frac{\rho \phi \bar{k}}{\sigma \bar{\Sigma}^*}$ is used in primary atomization modeling to determine $\bar{\Sigma}^*$. Lacking information on this variable, the equilibrium Weber number was set to unity, which means that the total energy was equally distributed

between the kinetic energy and the surface energy. This Weber number then made it possible to compute $\overline{\Sigma}^*$ and, finally, S_{turb} . We were able to extract the equilibrium surface density and the Weber number from the DNS, which allowed us to verify if this definition is adequate for the two examined mesh resolutions.

Another comparison was achieved by analyzing the work of Luret et al. [69, 70], who performed similar simulations, although the turbulence was not fully resolved at small scales (contrary to the validated turbulence used in the present study [87]) because the study's main objective was droplet collision [69, 70].

3.5 Results and Discussion

3.5.1 Equilibrium Weber number We^*

3.5.1.a Definition

The previous definition of the equilibrium Weber number ($We^* = \frac{\rho\phi\tilde{k}}{\sigma\overline{\Sigma}^*}$) tends to infinity or zero when $\phi \rightarrow 0$ or 1 (for example, in very dense two-phase flows), which is illustrated in Figure 3.2.

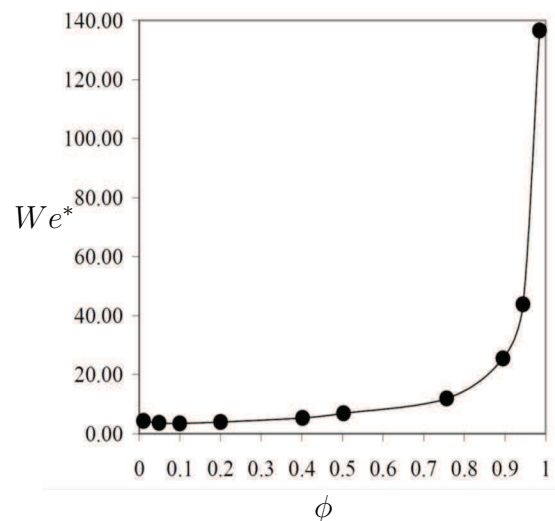


FIGURE 3.2 – Old definition of the equilibrium Weber number for various liquid volume fractions.

We propose a new definition of We^* to avoid this issue :

$$We^* = 4 \frac{0.5(\rho_l + \rho_g)\phi(1 - \phi)\tilde{k}}{\sigma\overline{\Sigma}^*} \quad (3.10)$$

This unconventional definition is an attempt to build a formulation of the Weber number that would be applicable to a wide range of liquid volume fractions encountered in atomization (from dispersed spray to dense spray). An example computation of the temporal mean of the Weber number ($We^* = \int \frac{1}{T} \overline{We^*} dt$) is shown in Figure 3.3. This figure also illustrates the convergence of the solution and the temporal evolution of the volume averaged Weber number.

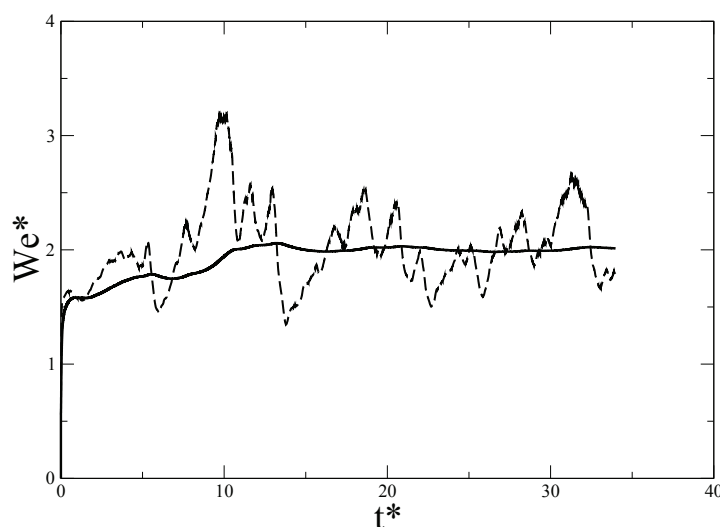


FIGURE 3.3 – Temporal evolution of the new equilibrium Weber number for a liquid volume fraction $\phi = 5\%$. Solid line : time averaged equilibrium Weber number. Dotted line : volume averaged equilibrium Weber number.

3.5.1.b Statistical analysis

The DNS permitted us to compute We^* and verify whether the assumption of the model ($We^* = 1$) was meaningful (results are shown in Figure 3.4). To compute the Weber number, $\overline{\Sigma}^*$ and \tilde{k} were volume averaged for the whole domain and then time averaged over at least 80 eddy turnover times ($\tau_t = \frac{\bar{k}}{\bar{\epsilon}}$) to assure proper statistical convergence. In the following, t^* is the time normalized by τ_t . An alternate averaging procedure (presented in the next section) was used in the simulation of different surface tensions.

It is remarkable that for these three configurations the value of the Weber number continually ranges from $We^* = 1$ to $We^* = 2.5$ instead of the previous formula-

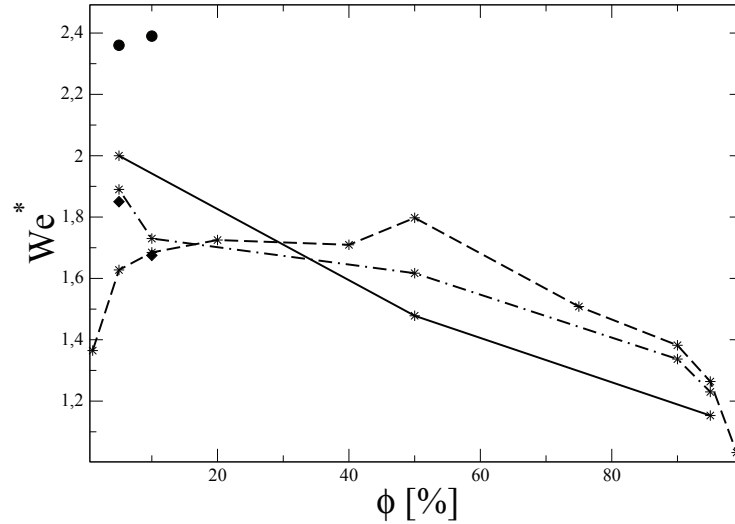


FIGURE 3.4 – Equilibrium Weber number for various liquid volume fractions. Solid line : 256^3 configuration. Dashed-dotted line : 128^3 configuration. Dotted line : results from Luret et al. [69, 70]. Symbols indicating the surface tension value : * for $\sigma_{ref} = 0.0135$, • for $\sigma = 0.8\sigma_{ref}$, and ◊ for $\sigma = 1.4\sigma_{ref}$.

tion where its variational range is large (see Figure 3.2). These values were observed even with a coarse grid, a not fully resolved turbulence, or a different surface tension, which may justify the use of Eq. 3.10. This property offers a particular advantage for the primary atomization model because all variables are known in Eq 3.10, with the exception of $\overline{\Sigma}^*$, which can, for example, be computed by assuming a Weber number equal to approximately 1.63 (which is the mean value of the equilibrium Weber number for all simulations). Alternatively, We^* can be interpolated using the 256^3 curve, which represents the most resolved case. However, Figure 3.4 shows that this approximation introduced potential limitations when the surface tension was reduced because it significantly increased the We^* . This did not occur when the surface tension was increased, in which case results were very similar to those obtained with the reference surface tension. Note that despite the high resolution of this simulation, solving the smallest scale of the flow remains a challenging issue. Thus, when the surface tension is reduced, smaller wrinkling of the interface would be expected. An increase of the mesh resolution, which may be necessary in this case, will be investigated in future research.

3.5.1.c Turbulent kinetic energy

An improved definition of the Weber number should account for the "true" kinetic energy $\overline{k_\Gamma}$ at the interface. Fortunately, this quantity is made available by DNS. $\overline{k_\Gamma}$ values were computed by extracting the velocities in cells that contain an interface and then averaging these velocities in space and time. It should be recalled that the velocity is continuous across an inert interface (which was the case in our study), allowing us to approximate $\overline{k_\Gamma}$. Because the statistics were based on a surface and not on the total volume, results are presented only for 256^3 configurations to insure adequate statistical samples of sufficient accuracy.

This quantity was compared with the following kinetic energies to determine which value was closest to $\overline{k_\Gamma}$: the Favre average turbulent kinetic energy \tilde{k} ($\tilde{k} = \frac{\rho k}{\rho}$), the liquid turbulent kinetic energy $\overline{k_l}$ ($\overline{k_l} = \frac{1}{2} \overline{\phi_{loc} \mathbf{U}'^2}$, where ϕ_{loc} is the local liquid volume fraction), and the global turbulent kinetic energy \overline{k} ($\overline{k} = \frac{1}{2} \overline{\mathbf{U}'^2}$) imposed by the forcing method. Results are presented in Table 3.2.

TABLE 3.2 – Turbulent kinetic energy (S.I. units)

ϕ	$\overline{k_\Gamma}$	$\overline{k_l}$	\overline{k}	\tilde{k}
5	6.66	6.33	5.20	3.6
50	2.62	2.52	2.55	3.6
95	3.41	3.55	3.58	3.6

An interesting point is that the Favre averaged turbulent kinetic energy \tilde{k} was very close to that of the interface $\overline{k_\Gamma}$ when $\phi > 50\%$. For example, for the 50% case $\overline{k_\Gamma} = 2.62$ and $\tilde{k} = 2.55$, and for the 95% case $\overline{k_\Gamma} = 3.41$ and $\tilde{k} = 3.58$. The liquid turbulent kinetic energy $\overline{k_l}$ was very close to \tilde{k} in dense cases because the liquid phase had a much higher density than the gas phase.

However, for the dispersed case ($\phi = 5\%$), it appeared that \tilde{k} was less relevant to characterize the kinetic energy at the interface : $\overline{k_\Gamma} = 6.66$, $\tilde{k} = 5.20$. The liquid turbulent kinetic energy was closer to $\overline{k_\Gamma}$: $\overline{k_l} = 6.33$.

This discrepancy can be explained by the kinetic energy behaviour contained in liquid structures : in the dense case ($\phi > 50\%$), the liquid structures were sufficiently large for turbulence to developed inside of them, creating vortices that eventually reached the interface, which caused it to stretch or wrinkle. This turbulence, which can be analyzed with the liquid turbulent kinetic energy $\overline{k_l}$ (or the Favre averaged turbulent kinetic energy \tilde{k}), is directly linked to the turbulent kinetic energy at the interface.

In contrast, for the dispersed case, the turbulence was encapsulated in small liquid structures. Consequently, the turbulence vanished or was severely limited. In this case, the interface dynamic resulted from interactions (coalescence or collision) between liq-

uid structures, and the wrinkling of the interface was limited by the surface tension force.

The interface velocity was directly managed by the liquid phase independently of the liquid volume fraction for values ranging from 5% to 95 %, which is not that unexpected given the high density of the liquid phase compared to that of the gas phase. Consequently, \bar{k}_l appeared to be more relevant than \tilde{k} to the computation of the equilibrium Weber number in atomization modeling. However, because only \tilde{k} or \bar{k} are available in most modeling approaches, the best option (based on DNS results) would be to choose the Favre averaged kinetic energy.

3.5.2 Analysis of S_{turb}

Section 3 (in agreement with previously conducted research) assumed that the definition of S_{turb} (Eq. 3.9) is adequate. Unfortunately, this postulated equation has not been directly verified either experimentally or numerically to the authors' knowledge. We therefore propose to examine this model by changing the surface tension σ between two computations to induce a surface density variation.

It is important to keep in mind, that the complete numerical domain of a DNS resolution corresponds to the subgrid evolution of one mesh cell in RANS or LES formalism for prescribed mean values of the physical parameters.

3.5.2.a Averaging procedure

Starting with a reference case, where $\phi = 5\%$, $\bar{\Sigma}_1^* = 13571 \text{ m}^{-1}$, and the total time simulated $t_{final} = 180\tau_t$, the averaging procedure was as follows :

- restart from this reference case every $5 \tau_t$ (see Figure 3.5)
- change the surface tension by a coefficient α , consequently $\sigma_2 = \alpha\sigma_1$
- continue the computation until a new equilibrium $\bar{\Sigma}_2^*$ is reached
- during the computation, extract the time evolution of the mean interface density $\bar{\Sigma}(t)$

Finally, an ensemble averaging was performed over the 36 simulations to reduce statistical noise. This procedure was used for two different α coefficients : 0.8 and 1.4. The first value mimics the breakup regime and the second mimics the coalescence regime. We captured the transient behavior of the interface density as well as the final equilibrium state $\bar{\Sigma}_2^*$. A three dimensional representation of the interface at two equilibria (initial $\bar{\Sigma}_1^*$ and final state $\bar{\Sigma}_2^*$) is shown in Figure 3.6 for the breakup case.

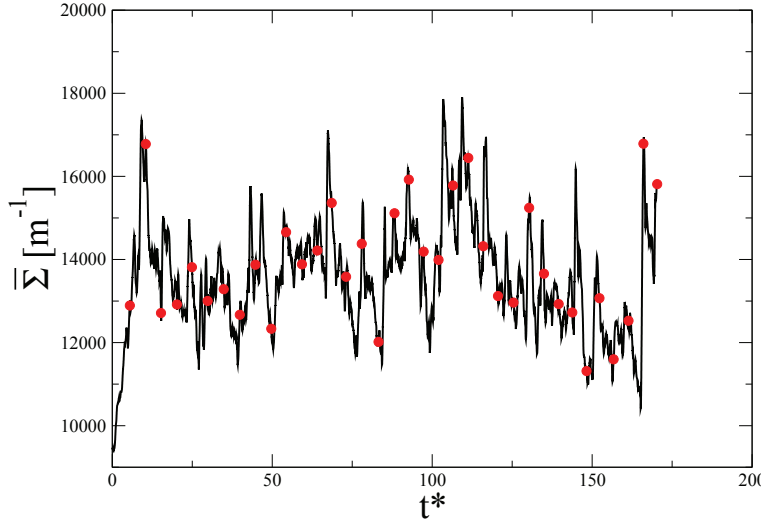


FIGURE 3.5 – Mean interface density time evolution $\bar{\Sigma}(t)$ for the reference case $\phi = 5\%$. Red circles indicate restart points used as an initial condition, i.e. each point corresponds to the departure of one simulation.

The figure on the left shows smaller liquid structures and a severely wrinkled interface, illustrating the increase of the interface density caused by reducing the surface tension.

The α coefficients had to be chosen carefully because the mesh resolution decreased when σ was set to a small value, which increased the fragmentation of liquid structures. Because the turbulent kinetic energy also plays a major role in defining the Weber number, we can modify its variable instead of affecting σ . However, this variable is not instantaneous and also alters the eddy turnover time τ_t . We therefore chose the more convenient surface tension variable.

High computational costs involved in capturing the transient behavior of the interface density (ensemble averaged over 36 simulations) limited our mesh resolution. The grid we chose for the procedure had a resolution of 128^3 .

3.5.2.b Transient regime results

Results are presented in Figure 3.7. Some statistical noise remained even with an important ensemble averaging, but this noise was negligible compared to the variational range of the solution.

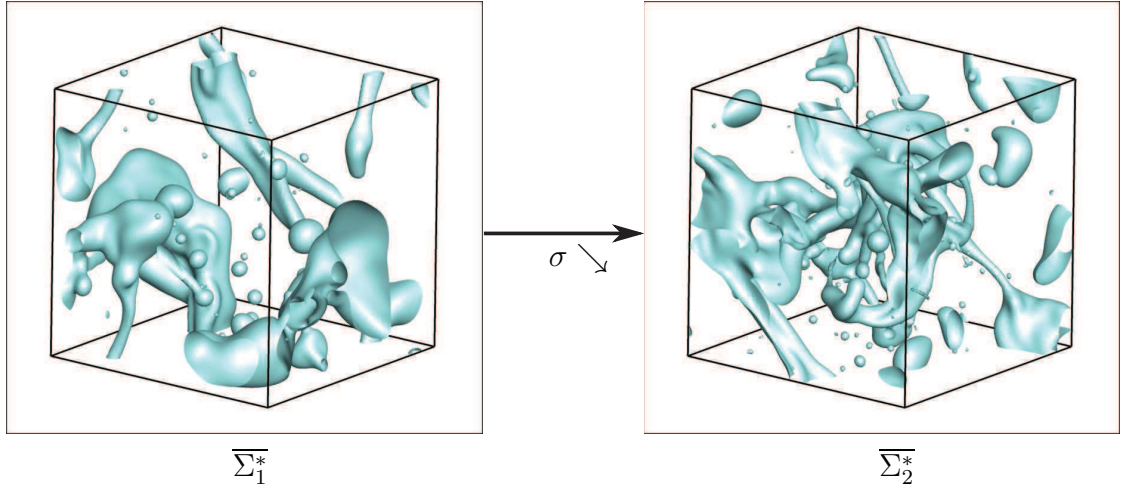


FIGURE 3.6 – Three dimensional representation of the liquid-gas interface from initial ($\bar{\Sigma}_1^*$) to final equilibrium ($\bar{\Sigma}_2^*$) for $\phi = 5\%$ in the breakup regime.

As expected, the interface density increased with time because of the modified surface tension; the new equilibrium value in this case reached $\bar{\Sigma}_2^* = 15270 \text{ m}^{-1}$. For the coalescence case, the interface density decreased, and the new equilibrium value reached $\bar{\Sigma}_2^* = 11652 \text{ m}^{-1}$. The very rapid transient evolution of the interface density appeared to be quite similar in both cases.

As mentioned previously (Eq. 3.8), S_{turb} remained the only term in the interface density equation in this configuration. Consequently, this term can be verified by comparing it with DNS data. The initial condition and the final equilibrium value $\bar{\Sigma}^*$ of the ordinary differential equation (ODE) were based on the DNS data to concentrate on the interface density time evolution.

The equilibrium was reached too quickly with the initial equation (see Figure 3.8), leading to an overestimation of the interface density value in both cases (breakup and coalescence). However, the rewritten equation we used to define this evolution promises to be adequate because it already provides a satisfactory approximation, which was not evident prior to our study.

The modeling constant C_Σ had to be adjusted to correctly match the DNS results. The best value we found for the constant was $C_\Sigma = 0.4$, based on DNS results for the breakup case. $C_\Sigma = 1$ (original value) and $C_\Sigma = 0.2$ were also indicated to measure the constant's impact on the solution. The constant was also used in the coalescence regime and seems to yield results, even with a larger variation of the surface tension : 40% instead of 20%.

Additionally, this constant should be independent of the studied liquid volume

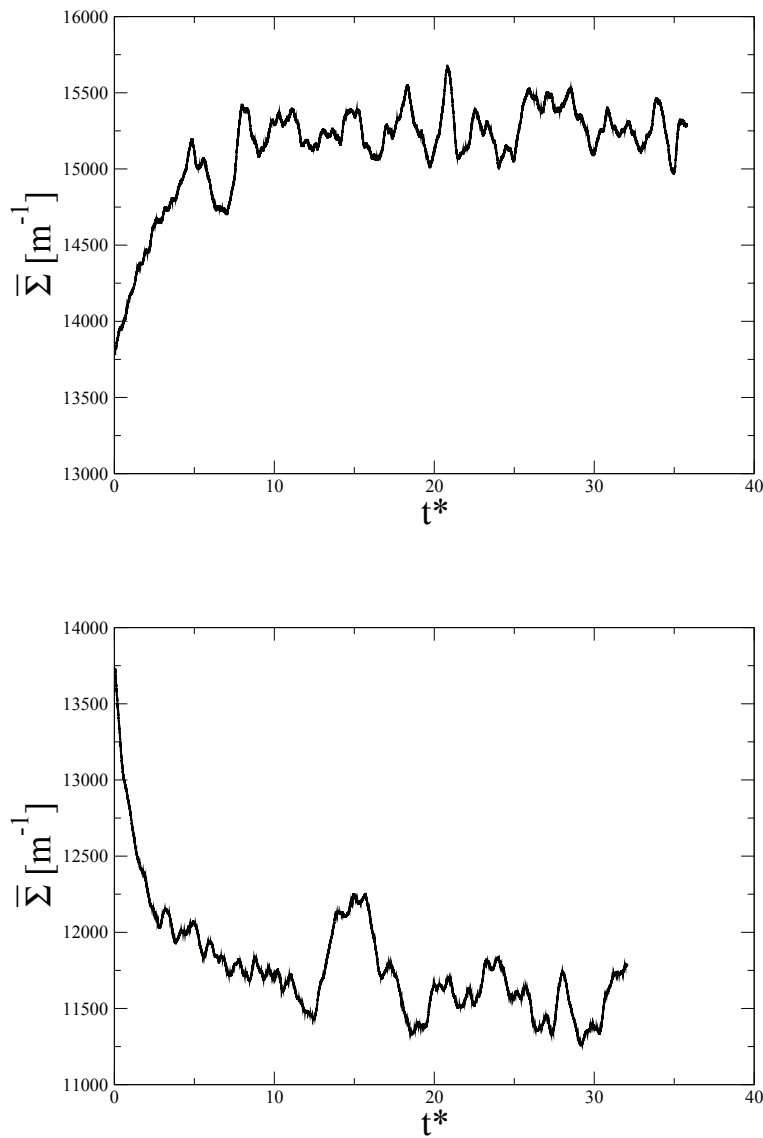


FIGURE 3.7 – $\bar{\Sigma}(t)$ extracted from the DNS data for $\phi = 5\%$. Top : breakup regime. Bottom : coalescence regime.

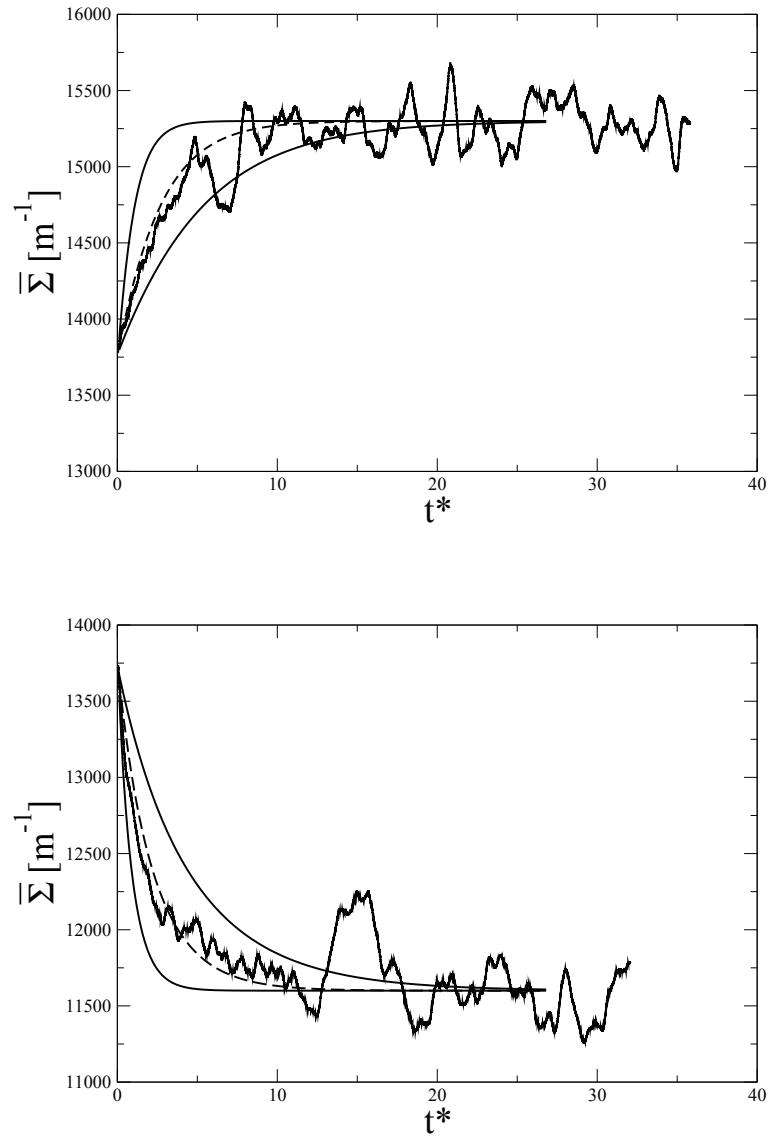


FIGURE 3.8 – $\bar{\Sigma}(t)$ extracted from the DNS data (solid line) and from the model (dotted line), where $C_\Sigma = 0.4$. The dotted curve is bounded by two curves where the constants $C_\Sigma = 0.2$ and $C_\Sigma = 1$ (original value from ELSA model) are identified by a solid line. Left : breakup regime. Right : coalescence regime. $\phi = 5\%$.

fractions. The liquid volume fraction was modified to confirm the validity of this constant, which allowed us to check if the constant remained identical. Results for $\phi = 10\%$ are shown in Figure 3.9 for breakup and coalescence regimes. The averaging procedure remained the same as before. Results were sufficient except for a small deviation of the coalescence case at $\phi = 10\%$. However, in all cases, the new constant showed better agreement with the DNS than the previous one ($C_\Sigma = 1$), and the shape of all curves remained similar. This analysis confirms the good behavior of the ELSA model to capture $\overline{\Sigma}(t)$ for different configurations, but a slight correction of the constant was nevertheless required to recover the DNS results.

3.6 Conclusion

This work presents an approach to improve primary atomization modeling by using DNS of two-phase flows. The study included a final direct comparison between the transport equation of the interface density in the ELSA model and the interface density behavior, including a full resolution of both phases and the interface. With a focus on the turbulence source term, we proposed an improved definition of the equilibrium Weber number based on DNS results. Ideally, the turbulent kinetic energy used in the equilibrium Weber number should be the kinetic energy at the interface. However, this information is not available in modeling. Instead, we propose to use the liquid kinetic energy or the Favre averaged kinetic energy in the equilibrium Weber number because their values are closer to the kinetic energy at the interface. Our results indicated that the liquid kinetic energy was the closest match, which means that the interface velocity was directly managed by the liquid phase, independent of the liquid volume fraction in the considered range.

We also discussed the interface density time evolution. The surface tension was modified between two simulations to capture how the interface density was able to reach a new equilibrium. This modification made it possible to verify if the equation used for the turbulent source terms in the transport equation of the interface density in the ELSA model was adequate. We call attention to the difficulty involved in attaining statistical convergence because the study was focused on the transient time evolution of the interface density. In primary atomization modeling, errors were quantified based on DNS results. We proposed improvements to the model, which were tested in comparison with DNS results for various configurations and different liquid volume fractions. Continued research should validate these changes for more complex configurations, such as experimental liquid jets, and check if modeling results are im-

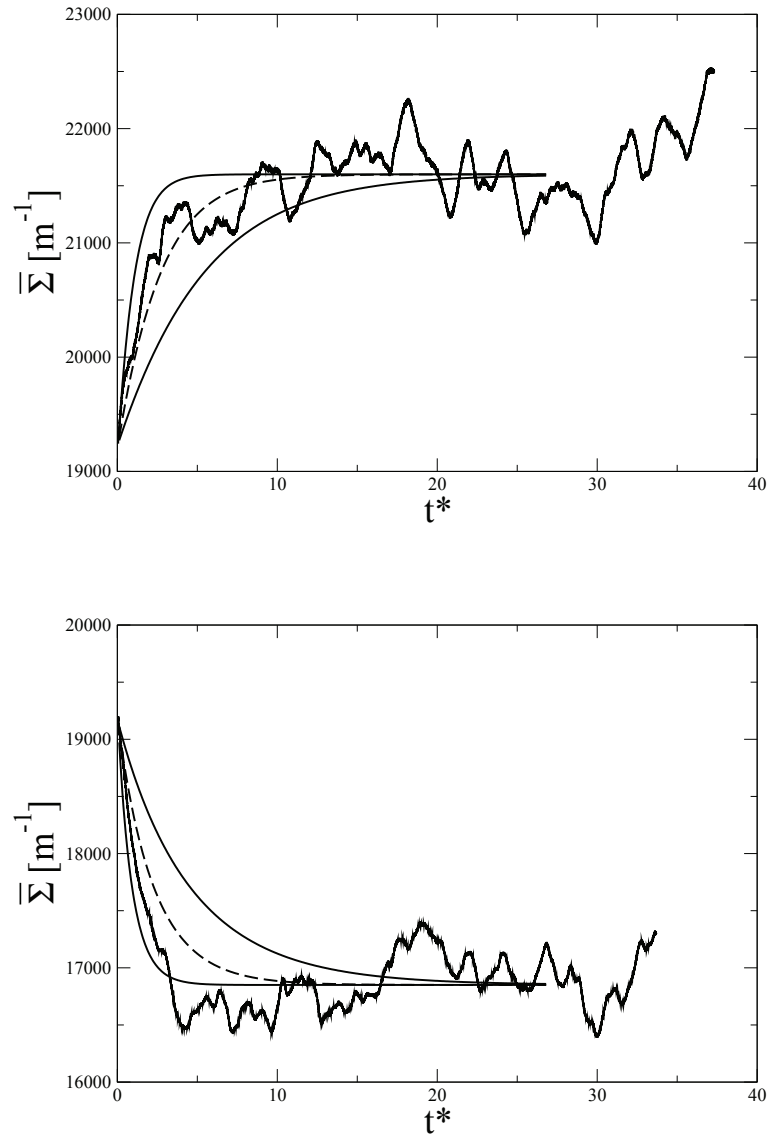


FIGURE 3.9 – $\bar{\Sigma}(t)$ extracted from the DNS data (solid line) and from the model (dotted line), where $C_{\Sigma} = 0.4$. The dotted curve is bounded by two curves where the constants $C_{\Sigma} = 0.2$ and $C_{\Sigma} = 1$ (original value from ELSA model) are identified by a solid line. Left : breakup regime. Right : coalescence regime. $\phi = 10\%$.

proved with the new formalism. Moreover, the DNS database must grow to cover a larger range of liquid volume fractions and density ratios to refine the statistics and to improve modeling.

Chapitre 4

Modélisation de l'évaporation à l'aide d'un scalaire passif

Dans ce chapitre, nous proposons une modélisation de l'évaporation avec un scalaire passif. Ce scalaire correspond à la fraction de mélange, fréquemment utilisée en combustion. A l'aide du code ARCHER nous pouvons étudier l'évaporation et le mélange dans un milieu diphasique dense, ce qui n'a jamais été fait à notre connaissance. Ce travail a fait l'objet d'une publication dans l'International Journal of Multiphase flows [87], nous retranscrivons donc cet article dans ce chapitre.

4.1 Abstract

This study focuses on the evaporation and mixing process in turbulent two-phase flows with a direct resolution of the flow near the interface. A first approach, using a passive scalar to represent the evaporation and mixing process in a two-phase dense turbulent flow, has been developed and applied in a homogeneous isotropic turbulence over a large range of liquid volume fractions. This model is restricted to low vaporization rates, thus the interface is barely affected by the evaporation process. A statistical analysis of the vapor field is performed. Obtained results suggest that the beta PDF, frequently used in combustion modeling, are not adequate to represent the state of scalar mixing when interfaces are taken into account.

A spectral analysis of the velocity and the scalar field is carried out simultaneously in both phases as well as in each phase separately. A procedure using the liquid volume fraction field is employed to separate the contribution of each phase. The evaporation process does not affect the spectrum shape of the scalar, but it has a direct influence on

the energy level of the scalar.

4.2 Introduction

The combustion of fuel issued from the evaporation of a liquid phase remains one of the major sources of energy, especially in the transport industry. Liquid injection in a combustion chamber is a critical step in fuel-air mixture preparation and its induced combustion. Hence, numerous studies have been devoted to the description and understanding of the injection process and its influence on vaporization and mixing. However, experiments are difficult, in particular in the vicinity of the dense zone of the spray. Numerical simulations could be of significant use if adapted methods are carefully developed following two main axes : the interface tracking ability and the phase change capture. These are sketched in Figure 4.1 along with several major liquid/gas interactions to be captured.

The last decade has seen the apparition of various numerical methods devoted to two-phase flow simulations with an accurate description of the interface position and evolution. Volume of Fluid [26], Level Set [20] and Front-tracking [33] are the most common interface tracking methods developed to carry out direct numerical simulations of two-phase flows. In such simulations, discontinuities at the interface have to be treated carefully. With this aim, numerical methods such as the delta function method [84] and the ghost fluid method [42] have been developed. The latter allows for applying sharp jump conditions at the interface and new works have proved it possible to accurately describe the primary atomization of liquid jets [32, 25, 41].

In the framework of combustion chamber modeling, interface tracking has to be coupled with an evaporation process. Such studies are relatively recent because of the complexity of multiple interactions between the various physical phenomena that prove to cover a wide range of different space and time scales [97, 35]. Solving phase change requires the resolution of the Navier-Stokes equations, but energy and species equations have to be considered with appropriate jump conditions at the interface. The interface velocity is also affected by the phase change, as are mass and energy transfers (Figure 4.1). All of these constraints lead to numerous problems, in particular the difficulty to estimate the local vaporization rate, which depends on the species and temperature gradients at the interface. Recently developed numerical methods to study these flows are expensive, and only basic configurations can be considered so far. One of the first tentative attempts was dedicated to bubbly flows with a two dimensional moving mesh [61]. The mesh, which prevented wide deformations of the interface, limited this

study. Moreover, computational costs were prohibitively expensive. Thereafter, Calimez made a major step forward by coupling phase change with the VOF method to study droplet group combustion in two-dimensions [62]. Strong thermodynamic hypothesis were made to reduce computational cost and complexity. The same year, Juric & Tryggvason associated phase change with a front tracking method to simulate bubbly flows in two dimensions [63]. But this method was unable, at the time, to manage significantly deformed interfaces. More recently, Tomar et al. studied phase change with a coupled Level Set VOF method but found it was necessary to smooth discontinuities across the interface [65]. By using the Ghost Fluid method coupled with the Level Set method in two dimensional simulations, Tanguy et al. [6] and Gibou et al. [66] subsequently proposed a model to determine interface velocities aimed at solving continuity equations even including evaporation source terms. Strotos et al. analyzed droplet vaporization on a heated wall thanks to adaptive mesh refinement and the coupling between evaporation models and the VOF method [59]. Schlottke also developed a model to calculate velocities at the interface for deformed droplet vaporization in three dimensions with the VOF method [67].

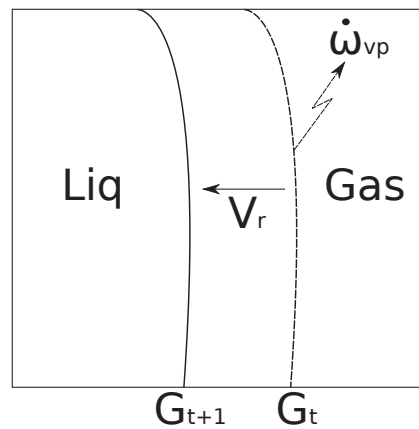


FIGURE 4.1 – Phase change phenomena at the interface. V_r is the regressing velocity, $\dot{\omega}_{vp}$ is the local vaporization rate, G is the Level Set function.

All of the above mentioned methods are very promising. However, their complexity prevents them from being used in practical geometries. In this work, we propose to simplify the interactions between the various physical phenomena while focusing on the capture of an accurate vapor field. Saturation conditions at the interface are assumed to be constant, particularly the vapor pressure. No energy equation is resolved, and the liquid's vapor evolution is characterized by an inert scalar. Because the flow remains inert, the vapor mass fraction is equivalent to the mixture fraction, which defines the level of mixing between vapor and air. The saturation level of vapor in the domain

can normalize this mixture fraction. It leads to the variable Z , which is thus bounded between 0 (no fuel vapor) and 1 (saturated fuel vapor). Z is an inert scalar, the evolution of which is driven by a standard convection / diffusion equation in the gas phase. Z is bounded by 1 at all interface positions. A sketch to illustrate the simplified evaporation process is shown in Figure 4.2. This is the first step towards a simultaneous understanding of atomization, vaporization and mixing processes in dense sprays. As a preliminary work, since the mixing characteristic time is very short compared to the evaporation delay, interface regression is not considered. We focus on the properties of Z when the flow is shifting from very dense towards dispersed liquid presence, which mimics the liquid spatial evolution of an atomization process. To accurately control the various inputs of the simulation, a three-dimensional forced homogeneous turbulence of a gas / liquid flow is considered with a liquid volume fraction ranging from 1% to 99%. Both phases will be resolved in DNS with the ARCHER code [32]; the interface tracking method that has been used is a coupled Level Set/VOF method. A high-density ratio between the two phases is chosen to simulate realistic engine conditions. Both quantitative and qualitative aspects are analyzed.

In the following part of this work, the constitutive equations and numerical procedures are first described. The flow geometry is then depicted along with the various prescribed parameters. Next, a statistical analysis of the mixture fraction is carried out by studying the evolution of the probability density function of Z . Finally, an original spectral analysis is proposed, giving rise to the discussion of the links between droplet dispersion, the evaporation process and the final topology of vapor of liquid.

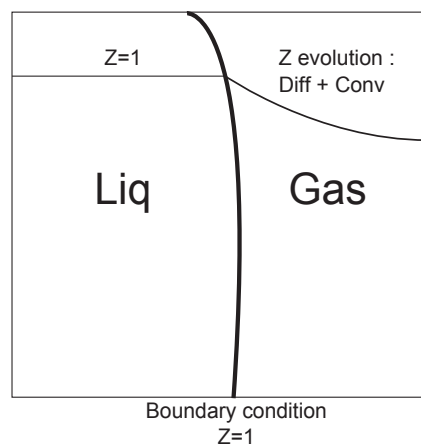


FIGURE 4.2 – Phase change modeling at the interface in the present work.

4.3 Numerical considerations

4.3.1 Navier-Stokes and scalar equations

The joint Level Set/VOF method is coupled with a projection method to carry out the direct numerical simulation of incompressible Navier–Stokes equations :

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} = -\frac{\nabla p}{\rho} + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot (2\mu \mathbf{D}) + \mathbf{g} + \mathbf{f} + \frac{1}{\rho} \sigma \kappa |\nabla G| \delta(G) \mathbf{n} \quad (4.1)$$

where p is the fluid pressure, \mathbf{U} the velocity vector, \mathbf{g} the gravity vector, μ the dynamic viscosity, and \mathbf{D} the viscous deformation tensor. At the interface, the surface tension force can be considered based on the Dirac function $\delta(G)$: σ is the surface tension, \mathbf{n} the normal unit vector, κ is the curvature computed from the Level Set function G (definition of κ , \mathbf{n} and G are given in Section 2.2). The gravity term is neglected in this study. To solve the derivatives, a fifth-order scheme, WENO 5 [75], is used for convective terms, and a second-order central finite difference scheme is chosen for diffusive terms. (See [32] for further details concerning the numerical procedure.) A forcing method is necessary to maintain the turbulent kinetic energy at a prescribed level. This is achieved through the source term \mathbf{f} , which induces linear forcing [77]. It results in $\mathbf{f} = A\mathbf{u}'$ where A is the forcing coefficient, \mathbf{u}' represents velocity fluctuations, and $\bar{\mathbf{u}}$ is the mean flow velocity. In this paper, $\overline{(\cdot)}$ refers to volume averaging. A Reynolds decomposition has been applied to the velocity field \mathbf{U} . The evolution equation of the turbulent kinetic energy $k = \frac{1}{2} \overline{\mathbf{u}'^2}$ may be written :

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}} k) = C_k + 2Ak \quad (4.2)$$

where C_k regroups the typical energetic contributions (i.e. without forcing) for the sake of clarity. The estimation of C_k involves a phase change and a liquid-gas interface. It is therefore complex to estimate A directly from equation 4.2, thus, the following two-stage procedure has been set up :

Stage 1 - Estimation of C_k^{n-1} based on the A^{n-1} constant value :

$$C_k^{n-1} = \frac{k^n - k^{n-1}}{\Delta t} - 2A^{n-1} k^{n-1} \quad (4.3)$$

Stage 2 - Computation of the forcing constant A^n based on C_k^{n-1} :

$$2A^n k^n = \frac{k_c - k^n}{\tau_f} - C_k^{n-1} \quad (4.4)$$

where k_c is the chosen level of kinetic energy, τ_f is a characteristic relaxation time ($\tau_f = 3\Delta t$ has been retained in this study) to avoid a sharp forcing term. Thus, the force coefficient A is computed at each time step to introduce the forcing term f in the Navier-Stokes equations.

This method maintains a statistically stationary Homogeneous Isotropic Turbulence (HIT) in the whole domain.

To correctly describe the interface, the VOF method is used jointly with the Level Set to enforce mass conservation [32]. For the sake of clarity, the mean value of the VOF method scalar is called the liquid volume fraction $\bar{\phi}$, and the local liquid volume fraction within a cell is ϕ . They are defined as follows : $\bar{\phi} = V_l/V_t$, where V_l is the total volume of liquid and V_t the total volume of the domain. $\phi = V_{lc}/V_c$, where V_c is the cell volume and V_{lc} is the volume of liquid within a cell. ϕ respects the following transport equation :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = 0 \quad (4.5)$$

The equation is discretized following the scheme as defined by Sussman et al. [31]; details on the coupled second-order conservative operator split advection are not restated here.

In this work, the value of the liquid volume fraction is of primary importance. Varying the liquid volume fraction $\bar{\phi}$ from 1 to 95% allowed our study to range from droplet flows to bubbly flows.

The choice of a passive scalar is representative of an evaporation process with a low temperature level at the interface, inducing a low saturation level of vapor at the interface. In such a case, assuming a local thermodynamics equilibrium at the liquid-gas interface, an evaluation of the saturation level of the vapor mass fraction Y_{vs} can be made based on the Clausius-Clapeyron equation. The considered scalar Z in this study is the normalized form of the vapor mass fraction : $Z = Y_v/Y_{vs}$. The scalar is thus equal to 1 at the interface ; it then evolves in the gas phase due to convection and diffusion. In this preliminary study, it is considered that the amount of mass of liquid transferred in the gas phase is small enough if the saturation equilibrium is reached rapidly, which is the case. Therefore, the mass of liquid in the domain remains constant while the vapor phase evolution is considered and analyzed. This assumption leads to no significant phase change, but it is of practical interest to the study of mixing and scalar fields induced by vaporization when turbulence velocity fluctuations are greater than the Stephan flow velocity. The evolution equation of the inert scalar Z may be written :

$$\frac{\partial Z}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}Z) = \nabla \cdot (D_m \nabla Z) \quad (4.6)$$

where D_m is the diffusion coefficient. In this paper, $D_m = \nu_g$ in the whole domain, which corresponds to a Schmidt number equal to unity. A fifth-order WENO scheme is used for the convective terms. A second-order central finite difference scheme is used for diffusive terms. The time integration is performed using a third-order Runge-Kutta scheme, except at the liquid-gas interface. A boundary condition is imposed at the interface in order to sustain the necessary value of $Z = 1$ at the liquid-gas interface, allowing the resolution of equation 4.6. The method is quite simple since the following relation

$$\frac{\partial Z}{\partial t} = \frac{1 - Z}{\tau_w} \quad (4.7)$$

is resolved at the interface position. This allows us to impose the boundary condition implicitly. τ_w characterizes the time to reach the thermodynamic equilibrium in the mesh cell located at the interface. This status is assumed to always be satisfied at the interface. Moreover, the mesh cells are very fine (this is necessary to capture the interface curvature) thus τ_w must be very short while allowing a numerical tolerance. This characteristic time represent also the scalar injection rate. It has been set to $\tau_w = 4\Delta t$ in this study. Because the numerical methods of the solver are designed to cope with strong gradients (interface capture), Z is set to 0 in the gas and 1 at the interface (and in the liquid) at the initial time of the simulation. The scalar equation is solved in the entire domain. In the liquid, Z is fixed to unity during the simulation.

4.3.2 Interface tracking method

In the following, the interface tracking method and the treatment of discontinuities are recalled. More details can be found in the work of Menard et al. [32]. Level Set methods use a continuous function to describe the interface [90, 19]. This function is defined as the signed distance between any points of the domain and the interface. The 0 level curve of that function therefore provides the interface location. The convection equation to describe the motion of the interface in a given velocity field \mathbf{V} reads :

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla G = 0 \quad (4.8)$$

Eq. (4.8) is the hyperbolic type, and the discretization method must combine a high convergence order and robustness. Thus, for the distance function field, a 5th-order WENO scheme [75] is used for convective terms. The normal unit vector \mathbf{n} and the curvature of the interface $\kappa(G)$ are evaluated based on the Level Set function by :

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla G}{|\nabla G|} , \quad \kappa(G) = \nabla \cdot \mathbf{n} \quad (4.9)$$

The Level Set method G no longer remains a distance function when solving Eq. (4.8) because of the velocity gradients. A redistancing algorithm [21] is thus applied to keep G as the signed distance to the interface. A numerical resolution of Eq. (4.8) combined with the redistancing algorithm can induce mass loss in under-resolved regions. This loss is the main drawback of Level Set methods. To improve mass conservation, extensions of the method have been proposed [31, 37, 24]. Specific studies have been developed to evaluate some of these methods [32]. It has been found that the Coupled Level Set and Volume-of-Fluid method (CLSVOF, see [31]) is well adapted to capture atomization processes [32, 52]. The main concept of this method is to benefit from the advantage of both Level Set and VOF strategies : mass loss is limited through the VOF method, and a fine description of interface properties is kept with the Level Set. The Level Set permits the reconstruction of an accurate interface in each cell and helps in the transport of the liquid volume fraction. The location of the interface is slightly modified to retain an amount of liquid in a computational cell that corresponds to the liquid volume fraction determined by the VOF approach. This displacement is used to ensure mass conservation.

4.4 Numerical configuration

The solution is carried out in a 3D cubical domain with periodic boundaries similar to the study of Luret et al. [70, 69]. This configuration extends previous numerical studies on mixing in single-phase flows [92] to two-phase flows with a fully resolved liquid-gas formulation.

4.4.1 Parameters choice

The corresponding set of fluid parameters is the same as the one presented in chapter 2. The grid resolution is 128^3 .

4.4.2 Validation

Two issues have to be addressed concerning numerical validation in turbulent liquid-gas flows : First, numerical schemes used for single-phase flow DNS are not applicable for liquid-gas flows. Second, determining the smallest scales in turbulent liquid-gas flows remains an unsolved problem. Consequently, validating numerical configurations for turbulent liquid-gas flows can only be achieved partially. To overcome this difficulty, a systematic procedure has been defined. The first step in this procedure

involves validating the numerical method used for liquid-gas flows in a single-phase flow configuration by comparing it to classical non-dissipative DNS code. Then, the same numerical parameters are kept to carry out numerical simulations in two-phase flows. Finally, for one liquid-gas flow configuration, the mesh resolution is doubled in all directions to study the effect of the small scales that are not captured with the lower resolution.

4.4.2.a Single Phase flows

Numerical schemes are typically non dissipative and accurate in DNS of single phase flows. It is possible to compute converged results even for fifth-order moments by using spectral methods or high order difference schemes. The estimation of the Kolmogorov scale is wellknown in a HIT configuration, and the mesh size must be of the same order or slightly smaller than the Kolmogorov scale ($1.5 \geq \frac{\eta}{dx} \geq 1$, see [98]).

This kind of numerical scheme is inappropriate in the context of two-phase flows, particularly when dealing with high-density gradients. In the ARCHER code for instance, a fifth-order WENO scheme [75] is used as a good compromise between accuracy and robustness. A counterpart of its robustness is the possible introduction of numerical dissipative effects, which can affect small-scale turbulence. A comparison between the ARCHER code and a validated DNS code (used for single-phase flows in many configurations (ASPHODELE, [81, 57, 56, 82])) has been performed to evaluate this effect. An analysis of two key quantities (turbulent kinetic energy and dissipation) reveals that both codes give similar results for the parameters and the configuration presented in this paper in the case of single-phase flows. This indicates that the single-phase flow case is sufficiently resolved with the ARCHER code for the proposed set of parameters.

Additionally, to validate the forced HIT, an estimation of the accuracy of the forcing method has been performed for the configuration described by Rosales and Meneveau [77], where results have been obtained with spectral methods and high-order central difference schemes. The coefficient A of the forcing scheme (Eq. 4.2) is set to the same value as the one used by Rosales and Meneveau [77]. The resulting turbulent kinetic energy found by them is well recovered with the ARCHER code. This result confirms the ability of the ARCHER code to accurately reproduce the balance between turbulence production (forcing scheme) and dissipation.

4.4.2.b Two-phase flows

Determining whether the resolution is high enough is more complex in two-phase flow configurations. Since a definition equivalent to the Kolmogorov scale to determine the smallest scale of the flow is not yet available, it is impossible to estimate the necessary resolution. The smallest scales remain unknown ; they are not fully resolved even with the highest resolved DNS [41]. Hence, we have chosen to set the resolution for two-phase flows equal to the resolution determined for single-phase flow cases.

However, as a complement, a grid convergence is conducted to validate behavior of the flow studied in this article. Figure 4.3 shows velocity spectra of a 128^3 configuration and a 256^3 case (for $\bar{\phi} = 5\%$ and same box length).

Some energy has been transferred to small scales in comparison with two-phase flow cases. This effect is dumped by the WENO 5 scheme in the 128^3 configuration. However, a large range of the spectra remains unchanged, allowing us to consider that only small scales are not well captured. The 256^3 case is shown in the appropriate figures when possible, illustrating that the main results of this paper are not significantly affected by increasing the resolution.

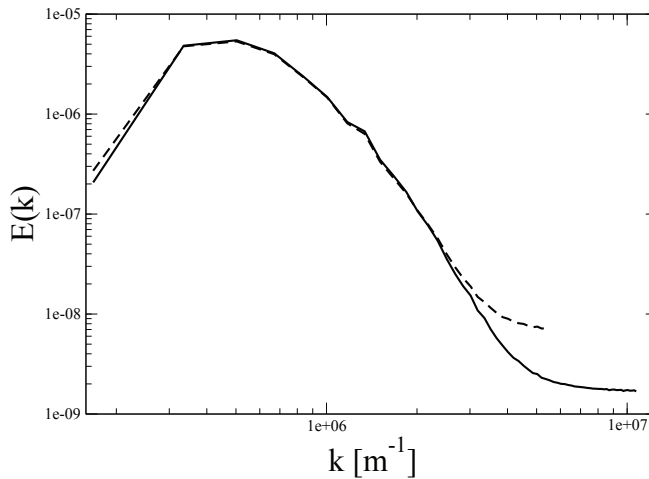


FIGURE 4.3 – Velocity spectra for two grid resolutions. Dotted line : 128^3 mesh, solid line : 256^3 mesh.

4.4.3 Initializing phase

The periodic box initialization is based on the work of Luret et al. [69, 70]. Eight droplets are introduced in each corner of the domain ; the sum of their volume is equal

to the fixed liquid volume fraction. All droplets have an initial rotational velocity in accordance with the prescribed kinetic energy. Linear forcing is inactive at the beginning of the simulation. The flow is quickly destabilized. Next, the linear forcing is activated and the turbulent kinetic energy reaches its desired level with a statistically stationary state. Then, the vaporization process is switched on. The normalized scalar Z is used to study the mixing of vapor with the ambient air in the gas phase. The initial scalar field is set to $Z = 1$ at the interface, $Z = 1$ in the liquid for continuity reasons, and $Z = 0$ in the gas.

4.5 Discussion

The scalar is analyzed from both statistical and spectral points of view. The first objective is to provide statistical information about the scalar field and the vaporization process. For combustion modeling, which is the final outcome of the atomization in a chamber, the statistical distribution of the vapor field is of primary importance. Previous works have been carried out either to characterize it with DNS of dispersed phase flows [58] or to propose models [99]. However, our study presents the first analysis involving a complete DNS of the fully resolved vapor field from the interface up to the far field of the spray.

4.5.1 Liquid/gas flow

Color levels of the instantaneous scalar field Z are presented in Figure 4.4 for six values of $\bar{\phi}$ ranging from 1 % and 95 %. The liquid/gas interface is also shown thanks to a 3D surface representation. At this point, configurations with a small liquid volume fraction (1 % and 5 %) are considered as dispersed cases when compared with dense configurations that are greater than 90 %. This assumption has to be relativized to the common definition of dispersed flows, which considers volume fractions generally below 0.001 %. These configurations cannot be represented by interfacial flows, and gaseous DNS solvers associated with Dispersed Phase Solvers (DPS) are commonly used in this case [56]. This means that the most dispersed cases studied in this paper (based on interface transport) may be considered as dense from the DNS-DPS point of view.

At low $\bar{\phi}$, (1 % and 5 %), small liquid structures with almost spherical shapes are present in the domain. These droplets are not affected by the surrounding gas because of the high-density ratio between the two phases. However, the forced turbulence

causes the liquid packets to collide regularly. Small gas structures appear (bubbles) for a high liquid volume fraction (95%). They are embedded in a significant quantity of liquid. This case may be called "dispersed bubble flow". The gas phase is strongly affected by the surrounding liquid flow, and bubbles are stretched by the shear force due to the liquid phase. The intermediate case ($\bar{\phi} = 50\%$) is more complex. Both phases are present in similar proportions. The gas follows mainly the liquid motion, but collision and coalescence are less commonly observed.

Despite a relatively small Weber number value, the interface is very wrinkled in all presented cases. Since accurately resolving the interface is of crucial importance to capture breakups and vaporization rates, the usual vaporization models based on spherical droplets are not relevant. In dense cases, the gas phase volume is smaller and scalar gradients are then higher, leading to quick vaporization and mixing. The gas reaches the saturated state after a characteristic time τ_{vp} . This time span can be estimated from the temporal evolution of the mean scalar value, presented in Figure 4.5. t^* is the time normalized by a characteristic turbulent time $\tau_{turb} = L/u'$ based on the velocity root mean square u' and the box length L . Dense liquid flows ($\bar{\phi} = 95\%$) reach the saturation level ($\tau_{vp} = 0.38t^*$) very quickly while a comparatively long delay ($\tau_{vp} = 10.2t^*$) is necessary for the dispersed configuration $\bar{\phi} = 5\%$. It defines the time range necessary for a flow with any intermediary liquid volume fraction to reach the saturation. For example, when $\bar{\phi} = 50\%$, then $\tau_{vp} = 1.97t^*$. Thus, τ_{vp} is correlated to $\bar{\phi}$ but in a strongly non-linear way. The high-resolution case presents a similar evolution of the mean value of the scalar \bar{Z} . A small discrepancy can be noticed showing a weak effect of small scales captured by the higher mesh resolution. However, the differences noticed for each level of liquid concentration are much greater.

4.5.1.a Mixture fraction fluctuations

To characterize scalar mixing and the evaporation process, the scalar RMS $Z' = \sqrt{(Z - \bar{Z})^2}$ is computed in the gas phase at each time step. The theoretical maximum value of Z' is given by $Z'_m = \sqrt{\bar{Z}(1 - \bar{Z})}$. This case represents a field of scalar Z with a maximum of fluctuations. Both Z' and Z'_m have been plotted in Figure 4.6 for three different liquid volume fractions. An effect of the mesh resolution on Z'_m can be observed, which is simply an amplification of the difference observed in Figure 4.6 for \bar{Z} . On the contrary, the difference is attenuated as far as the RMS Z' is concerned, showing a small effect of mesh resolution on the result.

A comparison with the results found by Eswaran and Pope [92] and Reveillon and Vervisch [58] can be carried out. The study of Eswaran and Pope concerned turbulent

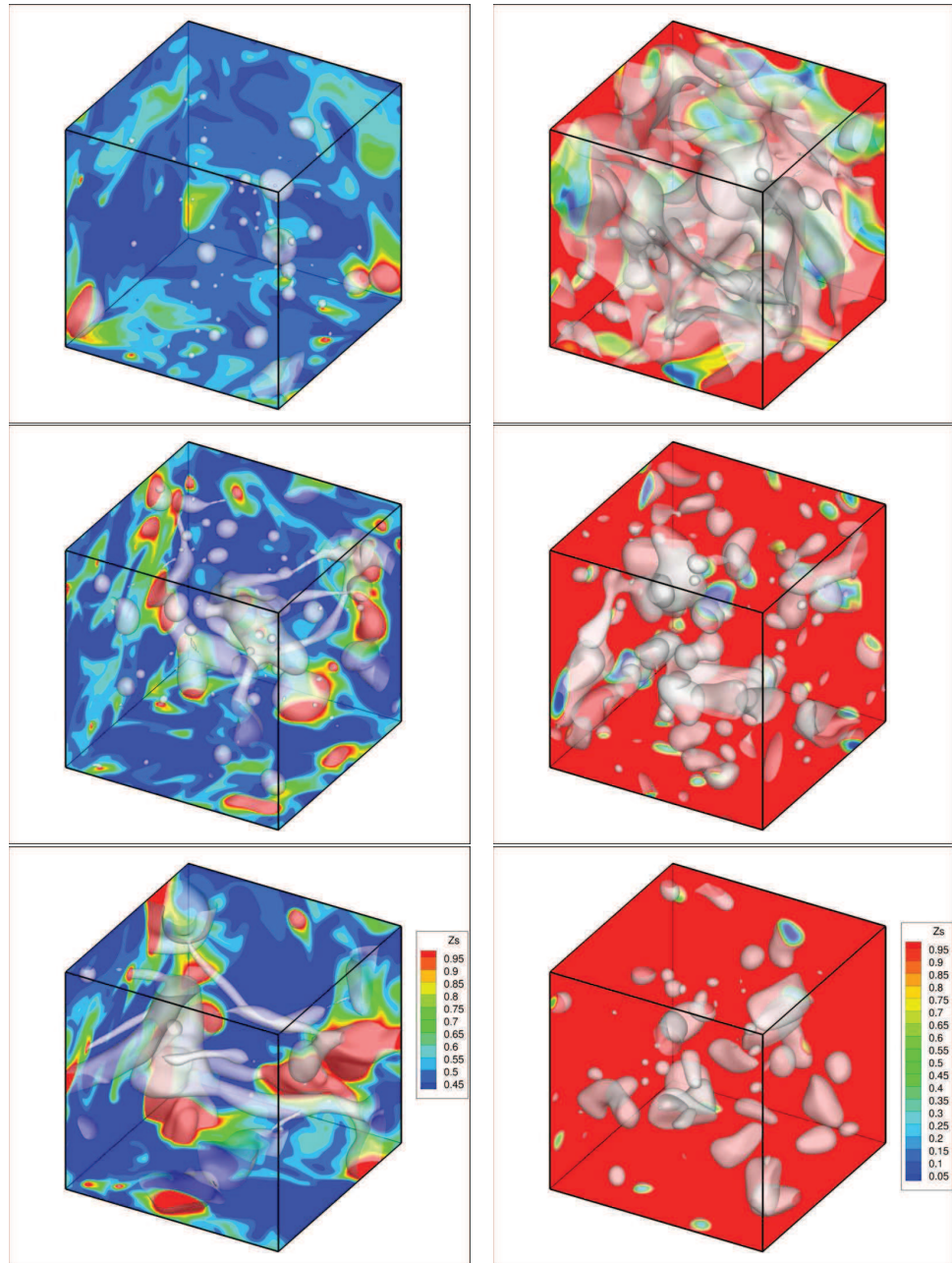


FIGURE 4.4 – Instantaneous scalar field with interface visualization (in white) at $\bar{Z} = 0.5$, for various liquid volume fractions $\bar{\phi}$. The first column represents the scalar field for low $\bar{\phi}$ (1,5,10% from top to bottom), and the second column at high $\bar{\phi}$ (50,90,95% from top to bottom).

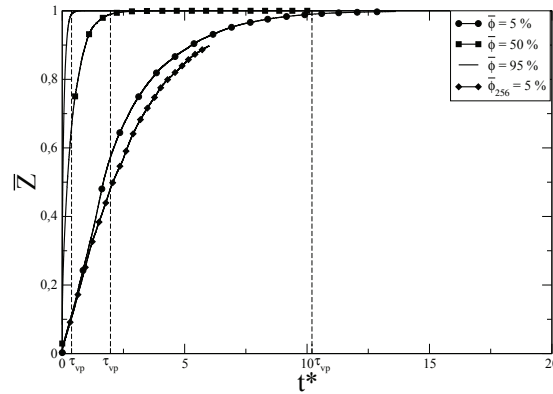


FIGURE 4.5 – Temporal evolution of the normalized mean vapor concentration for different liquid volume fractions $\bar{\phi}$.

mixing in purely gaseous flows. Therefore, no source of mixture fraction fluctuations exists. Thus, an exponential decay of Z' is observed because of scalar dissipation, which is the sole phenomenon acting on the mixture. The study of Reveillon and Vervisch [58] concerned turbulent mixing in very dispersed two-phase flows. Droplets were considered as a point source of fuel vapor. The authors showed that the scalar RMS increases initially because of the vaporization term \dot{Z}'_w (which generates local fluctuations of vapor) and then decreases due to the scalar dissipation rate. In fact, dissipation overcomes the production of fluctuations by vaporization after a specific characteristic time. For interface tracking DNS, a similar behavior of Z' is observed in Figure 4.6. However, contrary to the study of Reveillon and Vervisch [58], the mixture fraction increase is not only due to the apparition of a pocket of vapor around a group of droplets but also due to the characterization of the vapor boundary layer around each droplet or liquid structure. We have therefore made progress in the mixing description. This allows us to consider high liquid volume fractions in the study. As shown in Figure 4.6, the higher the liquid volume fraction, the higher the max of the RMS. This can be explained by the reduction of the gas volume available for mixing, then by a decrease of the vaporization delay, which is shorter when $\bar{\phi}$ increases. Thus, the balance between dissipation and production is modified, causing higher fluctuations of the mixture fraction.

An interesting point can be made by not only observing the first two moments of the mixture fraction but also its complete statistical evolution through the evolution of its probability density function (PDF).

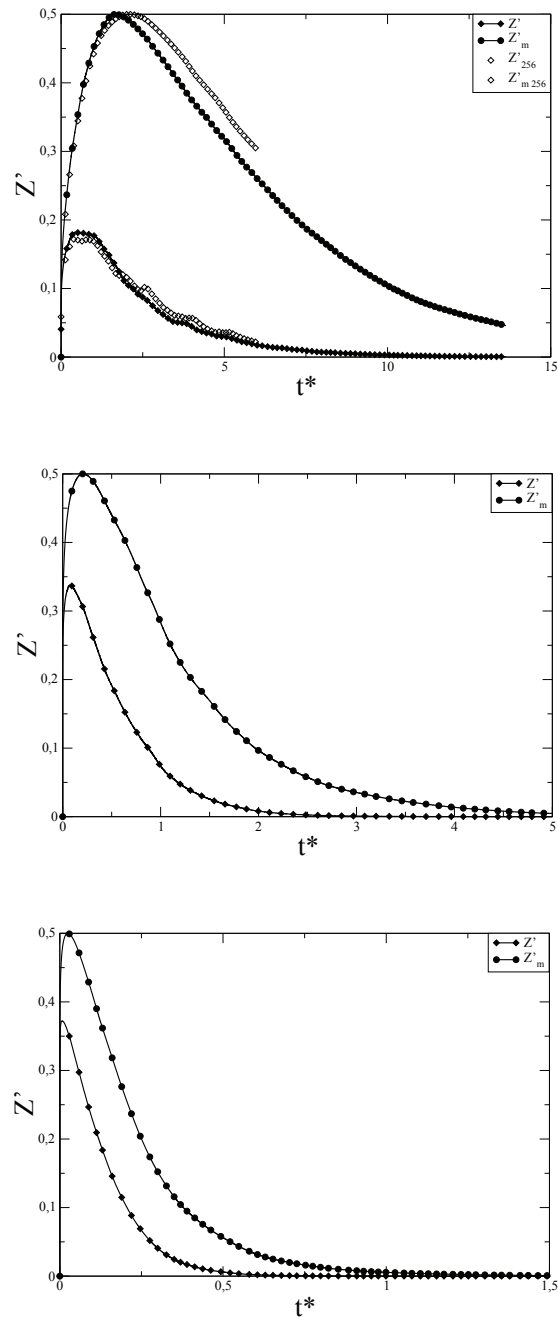


FIGURE 4.6 – Scalar RMS and max RMS, for $\bar{\phi} = 5\%$ (top), $\bar{\phi} = 50\%$ (middle), $\bar{\phi} = 95\%$ (bottom)

4.5.1.b PDF evolution

Inert scalar PDF (denoted $f(Z)$) are of major importance when studying turbulent inert or reactive flows. In particular, numerous combustion models are based on the PDF of Z because it allows us to compute the filtered or averaged chemical source term through $\bar{\omega}_c = \int_0^1 \dot{\omega}_c(Z^*) f(Z^*) dZ^*$. It is generally possible to analytically reconstruct the shape of the PDF that is required to close the reaction terms based on our knowledge of the first two moments (mean and variance) of the mixture fraction [100]. The prescribed analytical PDF shape required to describe statistical properties of Z must be able to evolve from a double delta function (high air/vapor segregation level) to a single delta function centered on the mean when perfect mixing is reached. A mathematical function that allows this kind of behavior is the beta function [101], which is based on an expression that uses the first two moments of Z as entry parameters : the mean \bar{Z} and the variance $\overline{Z'^2}$. It gives :

$$f(Z) = Z^{a-1} (1 - Z)^{b-1} \frac{\Gamma(a)\Gamma(b)}{\Gamma(a+b)} \quad (4.10)$$

where Γ is the gamma function. The two parameters a and b are related to the mean and variance through

$$a = \bar{Z} c, b = (1 - \bar{Z}) c \text{ with } c = \frac{\bar{Z}(1 - \bar{Z})}{\overline{Z'^2}} - 1 \quad (4.11)$$

DNS of dispersed flows does not resolve the flow at the droplet length scale since they are considered as point sources of mass, momentum and energy. This implies filtering at the interface level. Thus, the considered numerical system leads to a small numerical dispersion that can affect the small scale mixing analysis. It appears that the beta function was verified to capture the turbulent mixing in many experimental and numerical works in single-phase [92] or multiphase flows [56, 101] in the framework of dispersed droplets. However, this point should be verified when the entire scalar field is resolved.

To confirm this point, the flow is entirely resolved in both phases in this study, including the mass boundary layers located at the interface. Therefore, present results can be used to verify if beta functions are still valid when the vapor field is solved at the interface vicinity whatever the liquid volume fraction. However, we are particularly interested in results at a low liquid volume fraction, which may be used to evaluate the usual dispersed DNS mixing results. Nevertheless, there is a limitation. As stated in the introduction, the numerical cost can be exceedingly high when completely solving both phases at the interface, and the more the spray is dispersed the more expensive

simulations are. Consequently, the most dispersed case presented here corresponds to a liquid volume fraction of 1%. More intensive computations are necessary to decrease this liquid volume fraction towards a smaller value, but this will be the purpose of further study. In this paper, we are focusing on the transition from dense flows ($\bar{\phi} = 99\%$) to relatively dispersed flows ($\bar{\phi} = 1\%$).

To compare exact PDF evolutions observed in interface tracking DNS with the beta PDF, the evaporation process is observed at five fixed moments, represented in Figure 4.7. Each moment corresponds to a specific mean value of Z : $\bar{Z}_1 = 0.1$, $\bar{Z}_2 = 0.3$, $\bar{Z}_3 = 0.5$, $\bar{Z}_4 = 0.75$ and $\bar{Z}_5 = 0.95$, in order to study vaporization from the initialization (\bar{Z}_1) to the saturation state (\bar{Z}_5). The following instants: $t_{\bar{Z}_1}^*$, $t_{\bar{Z}_2}^*$, $t_{\bar{Z}_3}^*$, $t_{\bar{Z}_4}^*$, $t_{\bar{Z}_5}^*$ represent the delays necessary to reach each step. These delays differ depending on the initial liquid volume fraction $\bar{\phi}$ that is considered. In the description of the results, the scalar PDF $f(Z)$ is plotted at these five considered moments. This method to study the scalar statistically is used for all liquid volume fractions.

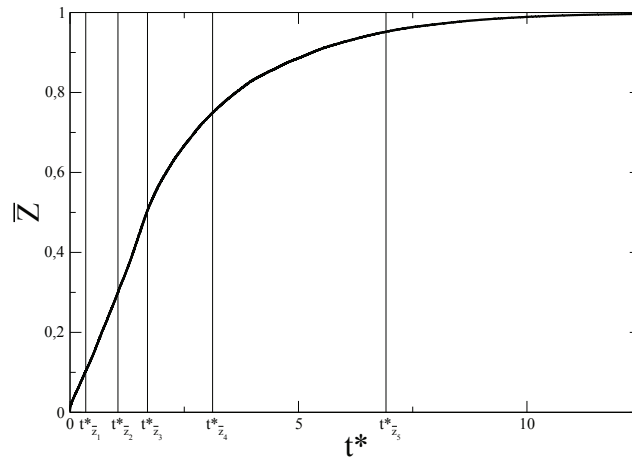


FIGURE 4.7 – Considered evaporation phases, Scalar mean \bar{Z} for $\bar{\phi} = 5\%$

Comparisons of effective scalar PDF obtained from DNS (DNS-PDF) and beta-presumed PDF (β -PDF) corresponding to similar moments are shown in Figure 4.8 with the exception of PDF concerning high liquid volume fractions ($\phi = 90, 95\%$), in which case statistics are not determined because of the lack of samples since only few bubbles are present in the flow.

DNS-PDF of the most dispersed cases (up to $\bar{\phi} = 10\%$, Figure 4.8 - solid lines) at first present a peak corresponding to $Z = 0$ statistics (the initial gaseous state in the

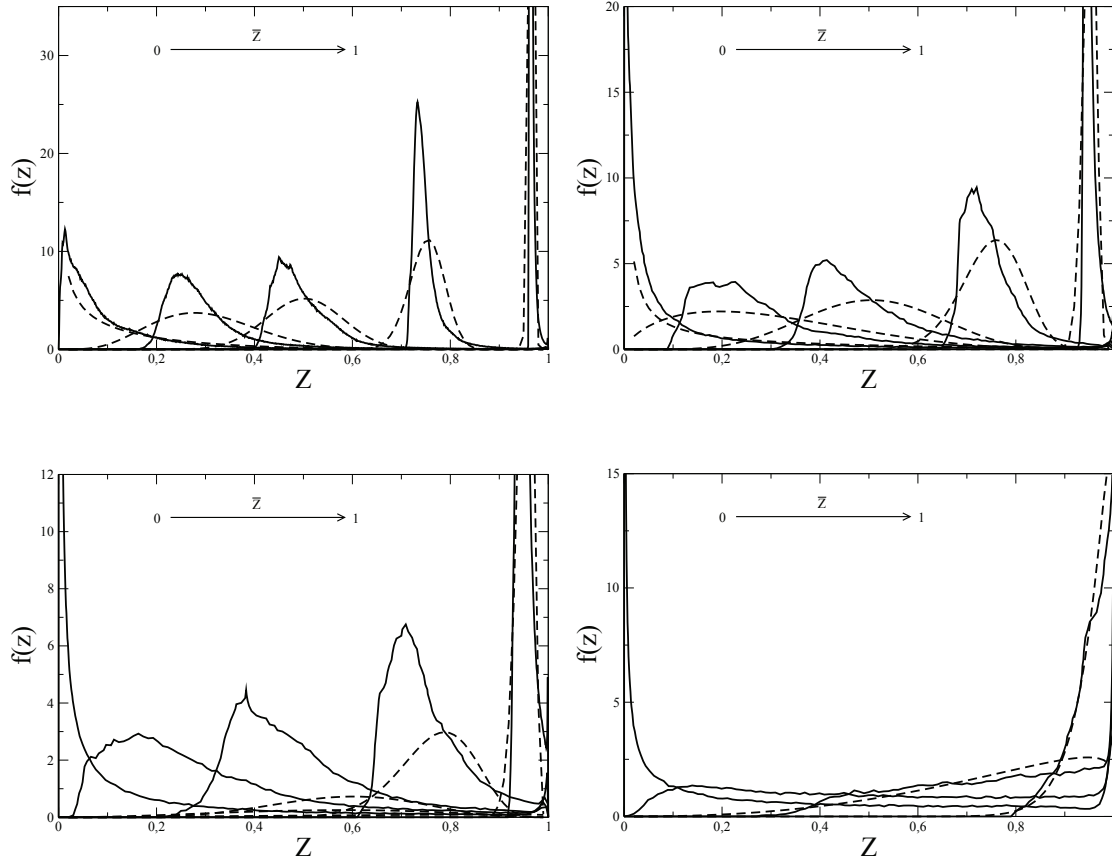


FIGURE 4.8 – Instantaneous computed PDF (solid line) and beta PDF approximation (dashed line) with the same mean and RMS for $\bar{\phi} = 1\%$, 5% , 10% , 50% (from left to right, and top to bottom) for the successive phases of the vaporization process, according to Figure 4.7.

simulations). Then evaporation maintains a $Z = 1$ level at the interface, and mixing occurs with the joint effects of convection and diffusion. This mixing leads to a widening of the peak whose maximum value decreases at first. Because evaporation is still in progress, the mean mixture fraction level increases towards its maximum value 1, corresponding to a saturated state in the liquid. As Z increases towards 1, the maximum of the DNS-PDF begins to increase again when the mixture is at approximately a third of the saturation level. Dispersion is decreasingly effective, and the PDF tends toward a Dirac function. In the case of a liquid volume fraction equal to 50% we see a different behavior since the initial statistical peak at $Z = 0$ shows a very large dispersion of the statistics, and a large variety of mixture fraction levels can be observed.

If the mean and the variance of the mixture fraction are used to reconstruct the PDF based on a beta function, it is apparent (Figure 4.8 - dashed lines) that the β -PDF is not able to capture the mixing properties. The mixture fraction is considerably spread around the mean, and several orders of magnitude of the statistical level can be observed. A counter intuitive observation can even be made since the β -PDF closely matches with the DNS-DPS when a dense flow is considered ($\bar{\phi} = 50\%$). But the more the flow is dispersed, the farther from reality the β -PDF is located. We could have supposed an inverse relationship since the dispersed case is controlled by the gaseous mixing. Moreover, different results are observed when using a DNS-DPS solver in the framework of a much more dispersed flow ([56]). Droplet sizes are assumed to be smaller than the Kolmogorov length scale in DNS-DPS. Consequently, they are also smaller than the mesh size. Local vaporization source terms (computed with evaporation models) are distributed on neighboring mesh nodes. The flow around and inside the droplet is not resolved, neither are boundary layers. We completely solve the flow around the droplet, including boundary layers, with interface tracking DNS. Additionally, since present two-phase flows are less dispersed, the volume occupied by scalar boundary layers over the total volume of gas available is greater than in dispersed DNS. These two facts induce the presence of specific statistical information that can be captured only with interface tracking solvers : the saturated interface leads to the permanent presence of unitary values of the mixture fraction Z . Because of a scale effect, this is almost invisible on the DNS-PDF curves plotted in Figure 4.8. A slight peak at $Z = 1$ can be observed for all curves of the case $\bar{\phi} = 10\%$, for example. It seems very small compared to the main peak centered close to the mean value of Z . However, this peak is the cause of the β -PDF failure to represent turbulent mixing. The β -PDF's flattening is due to its inability to capture information at the saturated level. An example has been drawn in Figure 4.9, representing two PDF with exactly the same mean and variances. The solid line curve presents two singularities : first a classical Gaussian shape curve and then a Delta function centered in $Z = 1$. The presence of this secondary peak, which corresponds to the saturated area in the boundary layers of our DNS simulations, leads to unbalanced statistics. If the β -PDF corresponding to the solid line PDF is plotted (dashed curve), it becomes evident that it is not able to cope with the presence of the interface without a specific treatment.

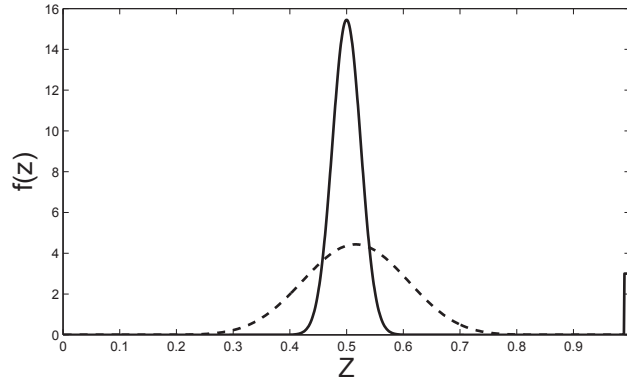


FIGURE 4.9 – Beta function incompatibility.

4.5.1.c PDF shapes

In Figure 4.10, normalized shapes of the DNS-PDF ($f(z) \times Z'$ with respect to $(Z - \bar{Z})/Z'$) are plotted for each part of the vaporization process. They reveal an important asymmetry. First, the vaporization process occurring for high values of Z affects the queue of the PDF. Even if the peak is almost invisible because of scale effects, it has been proven above to have a prevalent impact on Z statistics. As a consequence, when studying dispersed cases ($\bar{\phi} < 10\%$), the peak is logically located slightly below the scalar mean value with a dispersion that is the result of the mixing process. Previous studies of purely gaseous flows [92] have shown that mixing leads to a stationary PDF shape, close to a Gaussian shape, with a probability peak located at the mean value.

In our case, PDF tend to be self-similar over time for dispersed cases ($\bar{\phi} = 1, 5, 10\%$), except during the first stage (P1 in Figure 4.10) of the vaporization process. This first stage is the direct result of the interface topology at the beginning of the vaporization. Then, turbulent mixing far from the boundary layer takes over, which leads to a self-similar shape of the PDF. However, if the liquid volume fraction increases, the boundary layers strongly impact the PDF, and no self-similarity can be observed.

Note also that the Gaussian shape observed in the framework of purely gaseous flows is not retrieved in the framework of two-phase flows. Instead, a PDF with a shape close to a lognormal function may be seen in Figure 4.10. This is an important result for future model development. Even if a correction is proposed, which is necessary to take the presence of an interface into account, the β -PDF would not be able to retrieve the desired shape, and a lognormal shape appears to be more appropriate.

This assumption is confirmed by the fact that the shapes tend to be self-similar over time for dispersed cases ($\bar{\phi} = 1, 5, 10\%$), except during the first stage of the evapora-

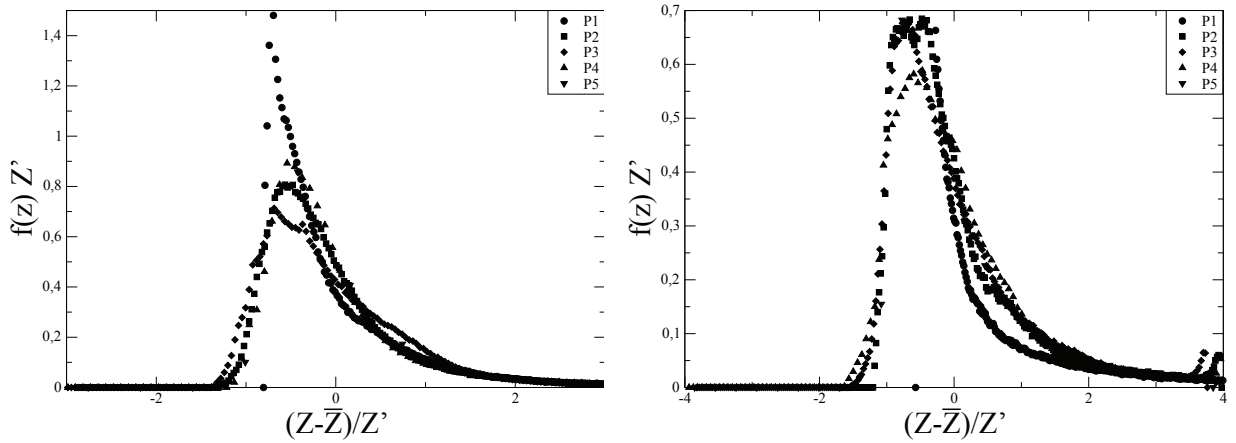


FIGURE 4.10 – Normalized scalar PDF for $\bar{\phi} = 1\%, 5\%$ for each phase of the vaporization process.

tion process. A mathematical function of this shape could replace the beta-function in this particular case. However, a detailed study on this subject should be performed to assess the self similarity property, because the PDF shape seems to be affected by the value of Z' .

This property is lost in intermediate and dense cases. Nevertheless, similar shapes are observed for part two and three of the evaporation process : two Dirac functions at $Z = 0$ and $Z = 1$ may be observed. For part four and five a spread shape over Z values is found with a high probability ($Z = 1$). In these cases, the vaporization process is faster than the scalar mixing thus the PDF do not have the time to converge toward a common shape ; they are more dependent on interface geometry.

4.5.2 Energy spectra analysis

4.5.2.a Velocity fields

Two-phase spectra Spectra of the velocity fluctuations of the gas/liquid mixture are presented in Figure 4.11. Spectra have a similar shape whatever the liquid volume fraction is. This shape is very close to those observed in single-phase flows, which is compatible with the fact that the liquid volume fraction level has no visible impact. This is an important first observation. However, this subject is not discussed in this work since a forcing procedure is used to maintain a constant turbulent kinetic energy

by adding a term in the momentum equation. This term could be at the origin of the spectra similarity. To clarify this point, a different configuration with a natural production of turbulent kinetic energy, like a shear flow, has to be considered. Another stumbling block lies in the lack of development of analysis procedures of two-phase flows with a high level of liquid volume fraction and a high liquid / gas density ratio. The impact of this ratio on the turbulence spectra definition and evolution is still uncertain. Spectra of velocity fluctuations, liquid volume fractions, and vapor scalars for interfacial flows with strong deformations of the interface (including high density ratios) have never been studied prior to this work, which presents some preliminary reflections on the subject. However, this is a major topic with a wide range of applications and issues. As a preliminary procedure, a common spectral analysis (generally applied in one-phase flows) has been carried out since there is no velocity jump at the interface position. Thus, a FFT procedure on the periodic domain is carried out to extract non-dimensional spectral density of energy visible in Figure 4.11. However, a phase separation procedure is necessary to discriminate both liquid and gas spectra.

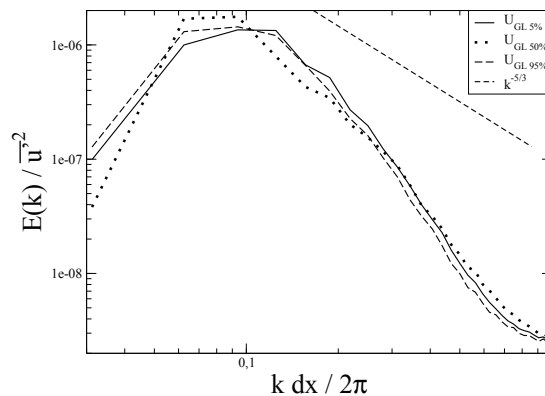


FIGURE 4.11 – Two-phase velocity spectra for three different liquid volume fractions : $\overline{\phi} = 5, 50, 95\%$

Phases separation FFT are applied to the entire domain, and the considered signal must be defined on all grid points, which complicates the analysis of phase-separated variables. Therefore, it is necessary to find a method to isolate each phase from a spectral point of view. If the velocity fluctuations are considered, the liquid volume fraction is used to separate liquid and gas in the physical space prior to FFT. Accordingly, it is possible to define

$$u''_g = (u - \overline{u}_g)(1 - \phi)$$

to study the gas phase and

$$\mathbf{u}''_l = (\mathbf{u} - \overline{\mathbf{u}}_l)\phi$$

for the liquid phase. $\mathbf{u}''_{l/g}$ is the velocity fluctuation's vector of the liquid (l) or gas (g) phase, respectively. $\overline{\mathbf{u}}_{l/g}$ is the mean velocity vector computed exclusively in the considered phase. Fluctuations of the variable in the complementary phase are nullified when a given phase is studied by using this procedure.

First, it is important to quantify the effect of nullifying velocity fluctuations by using the local liquid volume fraction ϕ . ϕ is a bimodal variable. It may be equal to either 0 or 1. Its maximum RMS may be determined thanks to $\phi'_m = \sqrt{\overline{\phi}(1 - \overline{\phi})}$. Therefore, the intermediate case corresponding to a liquid volume fraction $\overline{\phi} = 50\%$ undergoes the strongest fluctuations. Then, a symmetry around this maximum value is respected, and a dispersed droplets case ($\overline{\phi} = 5\%$) presents a similar maximum RMS of liquid volume fraction to a dispersed bubble case ($\overline{\phi} = 95\%$). A spectral analysis of ϕ is performed in Figure 4.12, and this hierarchy is also observed between spectra. They have been plotted for various liquid volume fractions. The most energetic case corresponds to $\overline{\phi} = 50\%$. All spectra present an inertial range with a $-5/2$ slope in the log-log representation. Considering the nature of the liquid volume fraction variable, no dissipation range is observed in the high frequency region. This spectrum shape influences the phase conditioned velocity fields since they are defined as a product of the velocity with this scalar ϕ . This point has to be considered in the following.

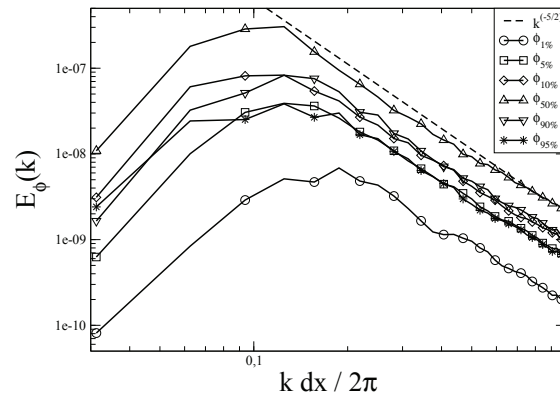


FIGURE 4.12 – ϕ fluctuations spectra for various liquid volume fractions.

Phase separated velocity spectra At this point, it is possible to consider the phase separated velocity spectra, which have been plotted in Figure 4.13. All spectra have

been normalized by the corresponding kinetic energy and focus is given to the various shapes that may be observed. Two major observations can be made concerning, on the one hand, the position of the maximum of the energy for each phase and, on the other hand, the inertial range.

First, let us consider the case $\bar{\phi} = 50\%$ where the same volume of liquid and gas are evolving in the domain. Spectra have exactly the same shape except for a slight difference in the high frequency range. If the configurations with droplets are considered (low liquid volume fraction : 1%, 5% and 10%), there is a shift of the maximum of energy, which is then separated for both phases : the gas phase presents a maximum of energy for the lowest frequency range (i.e. for the largest length scales) contrary to the liquid phase. This shift corresponds to the droplet structures that are smaller than the largest gaseous vortices. Moreover, there is a discrepancy between inertial ranges of both liquid and gas phases that do not have similar slopes. If configurations with bubbles are examined (high liquid volume fraction 90%, 95%), the maximum of energy, occurring at the low frequency range, is that of the liquid phase. The small size of the bubbles compared to the turbulent liquid vortices leads to a position of the maximum of the gas energy at a higher frequency.

If two symmetrical dispersed cases are considered, such as $\bar{\phi} = 5\%$ (droplets) and $\bar{\phi} = 95\%$ (bubbles), both phases interact very differently because of the significant difference of density between gas and liquid. Some bubbles in a liquid flow strongly undergo the liquid evolution and structures motion. Yet, droplets in a gaseous flow possess a strong inertia (in the cases considered in this work). Their motion will be weakly modified by the small structures of the flows and droplet/droplets interactions have a strong impact on their trajectory. Consequently, there is no real symmetry in the evolution of both phases when bubble and droplet dispersed cases are compared. The characteristic length scales are different as well. To serve as an example, an estimation of the equivalent Mean Sauter Diameter (SMD) L_{D32} of a mono-disperse spray corresponding to the same interface density area present in the DNS case is calculated ($L_{D32} = 6\bar{\phi}/\Sigma$ for droplet flows and $L_{D32} = 6(1 - \bar{\phi})/\Sigma$ for bubble flows, see [52] for details). As a reference and to demonstrate the non-symmetrical evolution of both phases the droplet SMD is equal to $29.82 \mu m$ in the case $\bar{\phi} = 10\%$, whereas in the bubble dispersed case ($\bar{\phi} = 90\%$) the bubble SMD is equal to $21.97 \mu m$. This estimation is commonly used in the Euler/Lagrange formalism to characterize the transition between the Lagrangian particles (secondary atomization) and the Eulerian description (primary atomization).

The characteristic length scale of the liquid volume fraction spectrum σ has been plotted in Figure 4.13 to compare its value to the maximum value obtained from the

velocity spectrum. The more one phase is dispersed, the more its characteristic length scale becomes equivalent to the liquid volume fraction length scale. This may be a bias of the method used to distinguish between each phase velocity spectrum that uses the liquid volume fraction, but it could also be an effect of the surface tension that creates droplets (bubbles). These droplets (bubbles) enclose a pocket of liquid (gas) that evolves mainly at the same velocity, creating a scale of velocity fluctuation related to the liquid volume fraction length scale.

4.5.2.b Scalar fluctuations

A clear definition of the scalar spectrum has to be given prior to any analysis. The mixture fraction Z is defined only in the gas phase, but we need to provide Z information in the liquid area of the flow without corrupting the resulting spectrum. Three basic approaches can be considered to separate both phases in the framework of the mixture fraction analysis : nullify scalar fluctuations by prescribing the Z values to its mean in the liquid or force Z values to either 0 or 1 in the liquid phase. The objective is to study Z fluctuations, thus the last two solutions are prohibited since artificial fluctuations would be added. These fluctuations would follow those of the phase function ϕ , which would corrupt the results. The first approach seems to be a good compromise. Z values along a given profile are shown in Figure 4.14 for a better understanding of the modified scalar field. Affecting the mean of Z in the liquid area will not affect the spectral analysis of the mixture fraction fluctuations.

It is apparent that the most important part of the vapor scalar field remains unaffected by the boundary layers. In this case, scalar mixing should remain dominated by single-phase mixing. This is possibly the reason for recovering a $-5/3$ slope in the spectrum.

A temporal evolution of scalar spectra is shown in Figure 4.15 for short times ($t^* \in [t_0^*, t_{z_1}^*]$). Initially, the scalar spectra have a particular shape with a uniform repartition of the kinetic energy on the different scales and quickly tend to a stationary spectrum with a $k^{-5/3}$ inertial range. The effect of the turbulence appears to be prevalent in comparison to the evaporation process. When looking at Figure 4.16, which plots the temporal evolution of scalar spectra at times $t_{z_1}^*, t_{z_2}^*, t_{z_3}^*, t_{z_4}^*, t_{z_5}^*$, the same shape is retrieved.

The scalar seems to have an inertial range larger than the velocity spectra. This fact has been duplicated in single-phase flows [102]. We recall that the liquid volume fraction can also affect the shape. The energy level decreases as time increases. Because scalar values tend to the scalar mean as time increases (as we can see on the PDF shown in Section 4.1), scalar fluctuations are reduced until the saturation state is reached (cor-

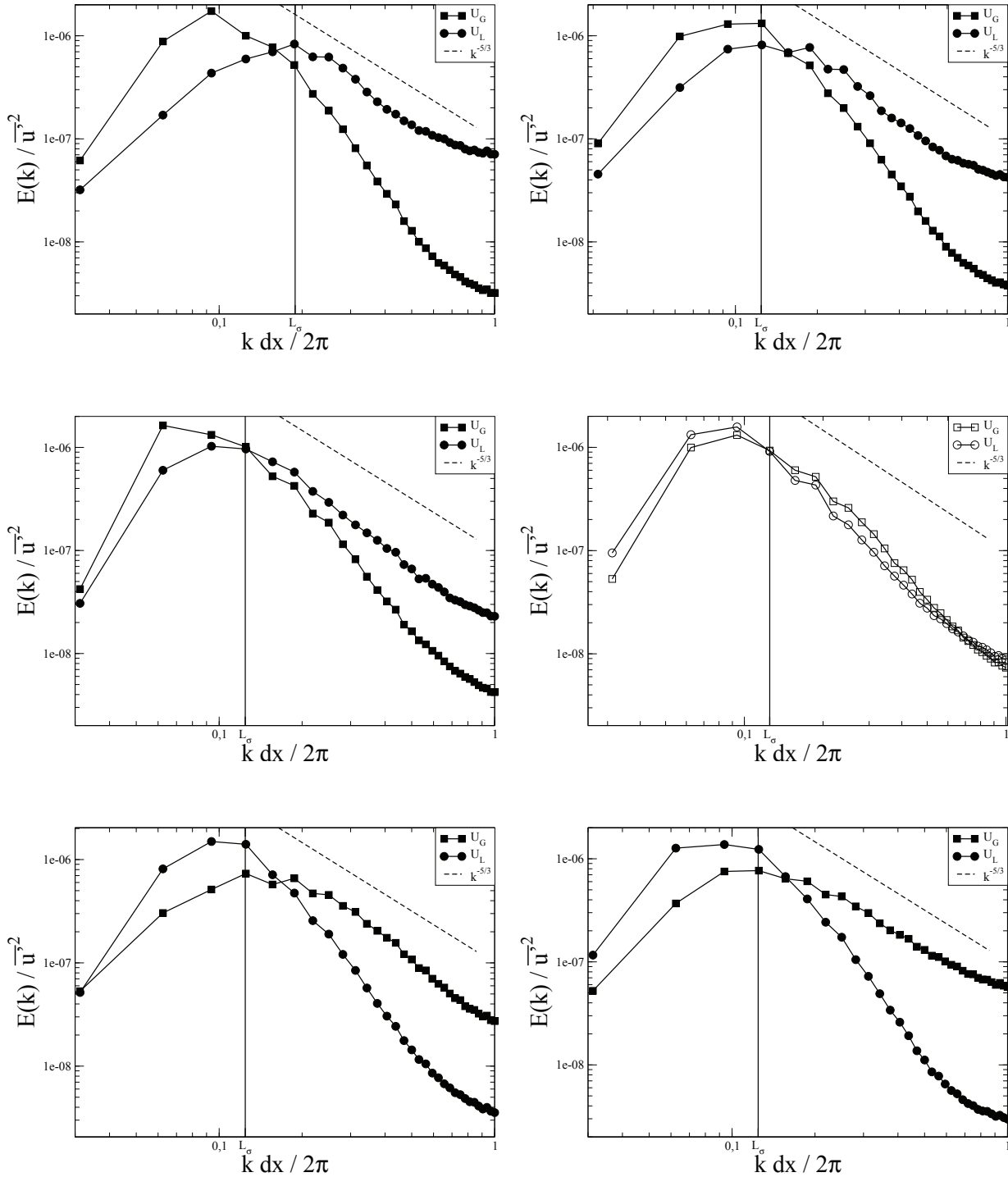


FIGURE 4.13 – Non-dimensional segregated velocity spectra for $\bar{\phi} = 1\%$, 5% , 10% , 50% , 90% , 95% (from left to right, and top to bottom).

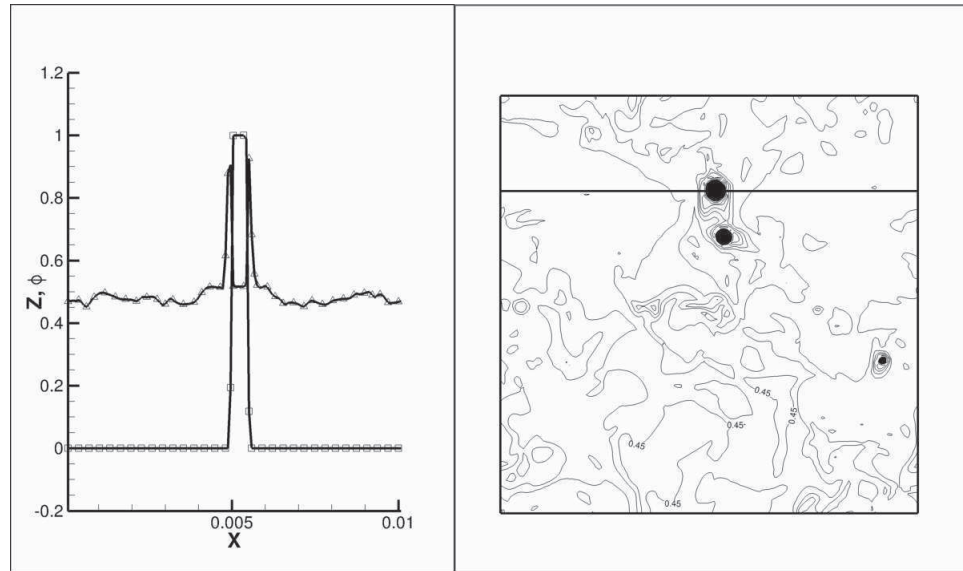


FIGURE 4.14 – Left : Z and ϕ values over X axis, square : ϕ , delta : Z . Right : Scalar iso-contour in thin lines, liquid phase representation in black, Z values extraction line in bold black.

responding to $Z=1$ in the entire domain).

The preceding section reveals the difficulty in studying the scalar spectrally in a two-phase flow configuration. Our first result shows that it is possible to recover single-phase flow behavior in the dispersed limit. For a higher liquid volume fraction, the influence of the complementary phase spectrum hides the vapor scalar behavior.

4.6 Conclusion

This paper presents the first attempt to study mixing under the constraint of a turbulent liquid-gas flow and evaporation with full resolution of both phases. It is evident that further works are needed to fully explore such complex phenomena. Among them, the effect of forced turbulence, mesh resolution, and the methods used to analyze each phase separately are of primary interest. However, by comparison to previous works that used a discrete approach for the minority phase, the present work gives valuable indications for modeling purposes.

DNS have been performed in homogeneous isotropic turbulence with a full resolution of both phases. Original results have been found when studying the scalar from both statistical and spectral points of view. Exact PDF shapes obtained with DNS are much closer to a lognormal shape than the commonly presumed beta PDF. Moreover,

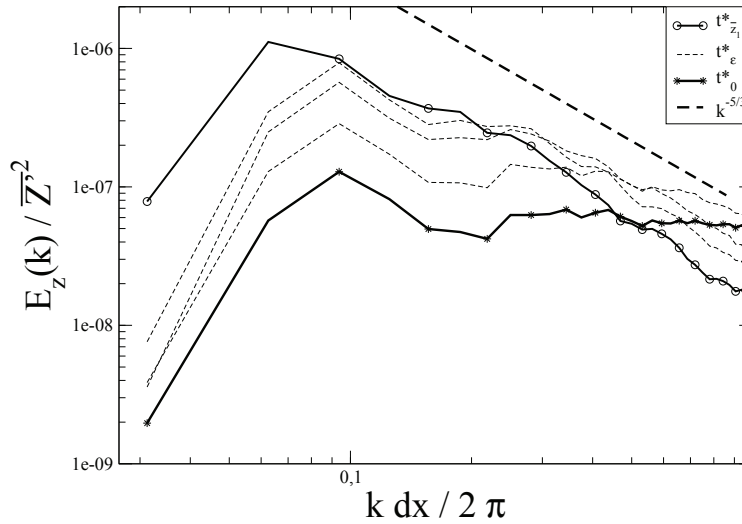


FIGURE 4.15 – Non-dimensional temporal evolution of Z spectra, for $\bar{\phi} = 5\%$. t_0^* is the time representing the initial scalar field, t_ϵ^* represents short times : $t_\epsilon^* \in [t_0^*, t_{z_1}^*]$. $t_{z_1}^*$ is the time corresponding to the first phase of the evaporation process (\bar{Z}_1).

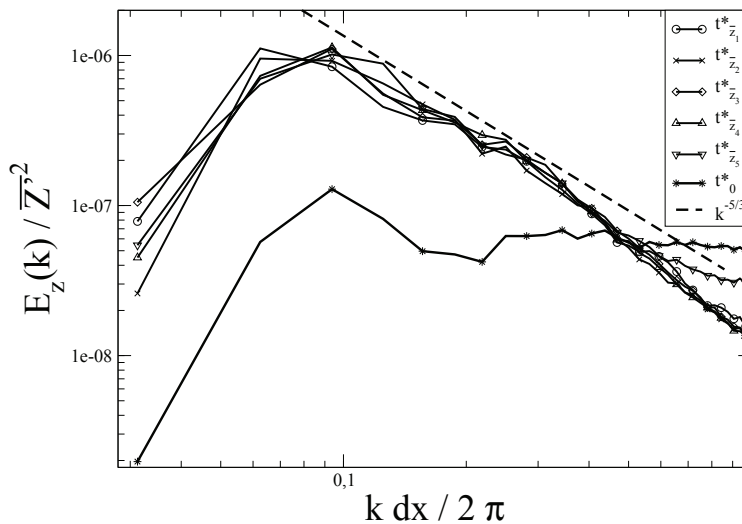


FIGURE 4.16 – Non-dimensional temporal evolution of Z spectra for each phase of the vaporization process, $\bar{\phi} = 5\%$. Notations are those used in Figure 4.6.

the interface mass boundary layer introduces a statistical flaw that is not captured by any presumed PDF. This is an important result since presumed beta PDF are often used in combustion modeling to describe the equivalence ratio field and to close the chemical source term.

Spectral analysis has been conducted for the first time in such turbulent liquid-gas and interfacial flows. A method has been proposed to isolate each phase in the spectral domain based on the local liquid volume fraction. The majority phase spectrum corresponds to the total velocity, except at a high frequency range, which has not been considered. Its behavior remains similar to that of a single-phase flow since the density is not considered in the computation of the spectra. Vapor scalar spectra in the gas phase have been analyzed. A specific procedure has been developed to extract the gas phase information. This procedure has first been validated qualitatively with a dispersed droplet case ($\bar{\phi} = 5\%$) where the vapor spectrum shows a similar behavior to scalar spectra in single-phase flows. The evaporation process does not seem to affect the spectrum shape but it has a direct influence on the energy level.

Acknowledgement

This work was granted access to the HPC resources of IDRIS under the allocation 2010-x2010026153 made by GENCI (Grand Equipement National de Calcul Intensif).

Chapitre 5

Résolution directe de l'évaporation avec régression d'interface

Dans ce chapitre, nous détaillons les méthodes choisies pour résoudre de façon directe l'évaporation. De nouvelles équations et méthode numériques ont été introduites dans le code ARCHER pour prendre en compte les nombreuses conditions de sauts à l'interface dûes au phénomène d'évaporation. Nous utilisons uniquement une méthode Level Set pour capturer l'interface, l'intégration de l'évaporation dans la méthode CLSVOF étant plus complexe et peu documentée (aucune référence à ce jour dans la littérature). Cette approche nous permet de créer une base de donnée de référence pour le futur développement de modèle dédiés à l'évaporation. Nous nous sommes basés sur la méthode proposée par Tanguy et al. [6] pour résoudre l'évaporation, à laquelle nous avons apporté quelques modifications.

5.1 Equations supplémentaires résolues

L'évaporation étant un changement de phase, il est nécessaire d'ajouter les équations d'énergie et des espèces chimiques.

5.1.1 Enthalpie sensible

Nous avons choisi de résoudre l'enthalpie sensible pour pouvoir intégrer plus aisément la combustion, mais il est également possible de résoudre la température ou l'enthalpie totale. L'équation de l'enthalpie sensible à faible nombre de Mach est présentée ci dessous [103] :

$$\frac{\partial \rho h_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} h_s) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \frac{\partial P}{\partial t} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (5.1)$$

Où h_s est l'enthalpie sensible, λ la conductivité thermique, T la température, P la pression thermodynamique, τ_{ij} le tenseur des contraintes. Cette équation est difficile à résoudre directement, du fait des nombreuses conditions de saut apparaissant dans les termes de l'équation. Pour réduire la complexité de l'équation, quelques hypothèses sont retenues :

- L'écoulement est considéré incompressible
- Dans chaque phase, la capacité thermique est constante, c'est à dire $C_p = C_{p_g}$ dans le gaz et $C_p = C_{p_l}$ dans le liquide
- La pression thermodynamique reste constante
- Pas d'échauffement par cisaillement

Ce qui nous donne l'équation suivante :

$$\frac{\partial h_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} h_s) = \frac{1}{\rho} \nabla \cdot (\lambda \nabla T) \quad (5.2)$$

Bien que simplifiée, cette équation nécessite une attention particulière pour prendre en compte les discontinuités à travers l'interface. En effet, h_s , $(\lambda \nabla T)$, ρ et C_p sont des variables discontinues à travers l'interface.

5.1.2 Fraction massique de vapeur

De la même manière que pour l'enthalpie, des simplifications sont possibles en émettant quelques hypothèses :

- L'écoulement est considéré incompressible
- La phase liquide est monocomposante
- La phase gazeuse est bicomposante : vapeur et air
- L'interface est à l'équilibre thermodynamique

On obtient l'équation suivante :

$$\frac{\partial Y_v}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} Y_v) = \frac{1}{\rho} \nabla \cdot (D_m \nabla Y_v) \quad (5.3)$$

Où $Y_v = \frac{m_v}{m_t}$, m_v étant la masse de vapeur et m_t la masse totale (vapeur+gaz).

Cela signifie que l'on suivra qu'une seule espèce : la vapeur. Par un simple bilan on peut récupérer la fraction massique de gaz : $Y_g = 1 - Y_v$. L'équation sera résolue uniquement dans le gaz, le liquide étant monocomposant. On suppose également qu'il

n'y pas d'absorption de gaz dans la phase liquide. L'interface étant à l'équilibre thermodynamique, on utilisera la relation de Clausius-Clapeyron pour obtenir la valeur de la fraction massique de vapeur saturante à l'interface.

5.1.3 Conditions de saut et conditions limites associées

5.1.3.a Thermodynamique

Nous utilisons un formalisme "One fluid" pour conserver les méthodes de résolutions standard du code ARCHER. Par conséquent, les conditions de sauts doivent être ajoutée pour la résolution des équations (5.2) et (5.3). Notons que l'enthalpie sensible est discontinu à travers l'interface ($[h_s] = (Cp_l - Cp_g) \int_{T_{ref}}^{T_\Gamma} dT$), contrairement à la température qui est continue si on considère l'équilibre thermique à l'interface. Nous utilisons la continuité de la température pour calculer plus facilement le terme de diffusion dans l'équation (5.2). On peut passer de la température à l'enthalpie sensible très simplement en utilisant la relation $h_s(T) = Cp \int_{T_{ref}}^T dT$, Cp étant choisi en fonction du signe de la fonction Level Set.

La conductivité thermique est également discontinue à l'interface : $[\lambda] = \lambda_l - \lambda_g$. Contrairement à Cp qui n'a besoin d'être estimé que dans une intégrale en un point et donc dans une phase donnée, la conductivité est présente dans les dérivées spatiales impliquant plusieurs points de maillages dans des phases différentes. La discontinuité dans les dérivées doit donc être appliquée avec soin. De plus, en présence d'un changement de phase, un saut supplémentaire apparaît dans l'équation de l'énergie. En effet, le changement de phase introduit une discontinuité dans le flux thermique [6, 62, 66] :

$$\dot{\omega}_v h_{lv} = [\lambda \nabla T \cdot \mathbf{n}] \quad (5.4)$$

Où $\dot{\omega}_v$ est le débit surfacique d'évaporation et h_{lv} la chaleur latente d'évaporation.

Concernant la fraction massique de vapeur, aucune condition de saut n'a besoin d'être ajoutée car seule la phase gazeuse est résolue. Cependant, une condition limite supplémentaire doit être implémentée à l'interface pour imposer la fraction massique de vapeur saturante Y_{vs} .

Y_{vs} est calculé à l'aide de la relation de Clausius-Clapeyron par l'intermédiaire de la pression de vapeur saturante p_{vs} :

$$p_{vs} = p_{atm} \exp\left(-\frac{h_{lv} M_v}{R} \left(\frac{1}{T_\Gamma} - \frac{1}{T_b}\right)\right) \quad (5.5)$$

$$Y_{vs} = \frac{p_{vs} M_v}{(p_{atm} - p_{vs}) M_g + p_{vs} M_v} \quad (5.6)$$

Où p_{atm} est la pression atmosphérique, M_v la masse molaire de la vapeur, M_g la masse molaire d'air, T_Γ la température à l'interface, T_b la température d'ébullition du liquide, R la constante des gaz parfait.

Y_{vs} nous permet l'obtention du taux d'évaporation $\dot{\omega}_v$ à l'interface :

$$\dot{\omega}_v = \frac{\rho_g D_m \nabla Y_v \cdot \mathbf{n}}{1 - Y_{vs}} \quad (5.7)$$

5.1.3.b Dynamique

Nous avons mentionné dans le chapitre 1 l'influence de l'évaporation sur la dynamique de l'écoulement. La condition de saut sur la vitesse est le mécanisme de naissance du flux de Stefan. On peut la faire apparaître en utilisant l'équation de la conservation de la masse à travers l'interface :

$$\dot{\omega}_v = \rho_l (U_l - U_\Gamma) \cdot \mathbf{n} = \rho_g (U_g - U_\Gamma) \cdot \mathbf{n} \quad (5.8)$$

Dans le cas d'une interface inerte, la vitesse est continue : $U_\Gamma = U_l = U_g$. On retrouve bien $\dot{\omega}_v = 0$. Dans le cas d'une interface avec changement de phase, la vitesse de l'interface est la somme de celle du liquide (ou du gaz) et de la vitesse de régression due à l'évaporation : $U_\Gamma = U_l + U_{reac}^l$ du côté liquide, $U_\Gamma = U_g + U_{reac}^g$ du côté gaz.

En remplaçant U_Γ par $U_l + U_{reac}^l$ dans l'équation (5.8), on obtient :

$$U_{reac}^l = \dot{\omega}_v \frac{1}{\rho_l} \cdot \mathbf{n} \quad (5.9)$$

On obtient la condition de saut suivante :

$$[U] = \dot{\omega}_v \left[\frac{1}{\rho} \right] \cdot \mathbf{n} \quad (5.10)$$

Notons qu'il est également possible d'appliquer le raisonnement ci dessus en utilisant la vitesse côté gaz : on obtient le même résultat.

Une condition de saut supplémentaire sur la pression apparait lorsque l'on considère une interface réactive [104] :

$$[p]_{evap} = -\dot{\omega}_v^2 \left[\frac{1}{\rho} \right] \quad (5.11)$$

Cette condition de saut peut être négligée car elle dépend de $\dot{\omega}_v^2$: $\dot{\omega}_v$ est généralement très faible. De plus, le saut dû à la courbure est de plusieurs ordre de grandeurs supérieur à $[p]_{evap}$.

La condition de saut de la vitesse implique une divergence non nulle à l'interface. Ce qui est a priori contradictoire avec l'hypothèse incompressible et la façon dont est calculée la pression dans le code ARCHER. De plus, la vitesse étant discontinue, des gradients très importants sont présents à l'interface, rendant les schémas numériques instables. Nous reviendrons sur ces points dans la section suivante.

Les conditions de saut supplémentaires liées à l'évaporation sont récapitulées dans le tableau 5.1. Y_v n'est pas présent dans ce tableau car il n'y a pas de conditions de saut à proprement parler sur cette variable (si on considère un liquide monocomposant), mais une condition limite à appliquer à l'interface.

TABLE 5.1 – Récapitulatif des variables discontinues liées à l'évaporation et leurs conditions de saut.

Variables discontinues	Conditions de saut
Flux thermique	$[\lambda \nabla T \cdot \mathbf{n}] = \dot{\omega}_v h_{lv}$
Pression	$[p]_{evap} = -\dot{\omega}_v^2 \left \frac{1}{\rho} \right $
Vitesse	$[U] = \dot{\omega}_v \left \frac{1}{\rho} \right \cdot \mathbf{n}$
Conductivité thermique	$[\lambda]$
Capacité thermique	$[Cp]$

5.2 Méthodes numériques

Maintenant que nous avons détaillé les équations à résoudre pour prendre en compte le phénomène d'évaporation, nous pouvons les utiliser de manière discrète. Cette section concerne la description des méthodes numériques utilisées.

5.2.1 Méthode Ghost Fluid

Le principe de la méthode Ghost Fluid a été décrit dans les chapitres précédents mais nous revenons sur cette méthode pour l'appliquer formellement à nos variables discontinues.

Prenons l'exemple du terme de diffusion de la température dans l'équation (5.2), si il n'y a pas de changement de phase ce terme présente une seule discontinuité due à la conductivité thermique λ .

Discretisons cette équation en 1D à proximité de l'interface dans le cas présenté en Figure 5.1 :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) = \frac{\lambda_l \frac{T_{i+1} - T_i}{dx} - \lambda_g \frac{T_i - T_{i-1}}{dx}}{dx} \quad (5.12)$$

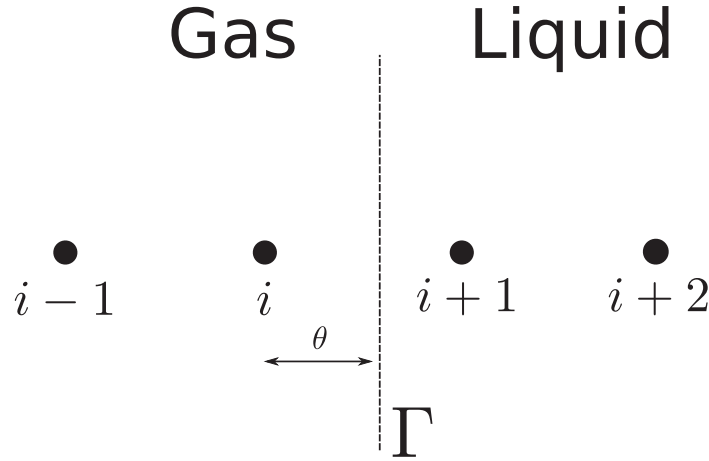


FIGURE 5.1 – Cas monodimensionnel étudié. θ représente la distance à l'interface.

Cette discrétisation n'est pas suffisante car elle ne prend pas en compte la discontinuité de λ . Des erreurs dispersives vont être créées, faussant les résultats du calcul. Le terme $\lambda_?$ signifie qu'en utilisant cette discrétisation directement, il est impossible de savoir quelle conductivité utilisée.

La méthode Ghost Fluid propose de trouver un coefficient λ_{Gh} qui prendra en compte la discontinuité, sans modifier le schéma utilisé. Pour ce faire, il faut utiliser les dérivées de part et d'autre de l'interface et la température à l'interface T_Γ :

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial x} = \lambda_l \frac{T_{i+1} - T_\Gamma}{(1 - \theta) dx} = \lambda_g \frac{T_\Gamma - T_i}{\theta dx} \quad (5.13)$$

Cette discrétisation ne pose pas de problème particulier car chaque phase est bien identifiée. θ est la distance du point à l'interface (donné par la Level Set) : $\theta = \frac{|G_i|}{|G_i| + |G_{i+1}|}$. Cependant, il nous faut une estimation de T_Γ pour pouvoir calculer les dérivées.

En utilisant la relation (5.13), on peut aboutir à une expression de T_Γ :

$$T_\Gamma = \frac{(1 - \theta) \lambda_g T_i + \lambda_l T_{i+1}}{(1 - \theta) \lambda_g + \theta \lambda_l} \quad (5.14)$$

Puis on injecte T_Γ dans la dérivée à gauche (ou à droite) de la relation 5.13 pour obtenir le coefficient de conductivité "Ghost" λ_{Gh} :

$$\lambda_{Gh} = \frac{\lambda_g \lambda_l}{\lambda_g (1 - \theta) + \lambda_l \theta} \quad (5.15)$$

Ce qui nous donne notre dérivée finale sous la forme :

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial x} = \lambda_{Gh} \frac{T_{i+1} - T_i}{dx} \quad (5.16)$$

Bien entendu lors de l'estimation de ce terme, λ_{Gh} n'a de sens qu'en présence d'une interface entre les deux points considérés. Dans le cas contraire, on utilisera la conductivité du gaz ou du liquide, la méthode utilisée dans le liquide seul ou le gaz seul reste correcte. La dérivée seconde pouvant être écrite en fonction de deux dérivées premières, on obtient pour le terme de diffusion complet :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) = \frac{\lambda_{Gh} \frac{T_{i+1} - T_i}{dx} - \lambda_g \frac{T_i - T_{i-1}}{dx}}{dx} \quad (5.17)$$

L'avantage principal de cette méthode est que le schéma n'est pas modifié. L'estimation du coefficient λ_{Gh} se fait avant le calcul des dérivées en fonction du signe de la Level Set. De plus, transposer le formalisme en trois dimensions est direct.

Cette relation est applicable dans le cas où l'interface est inerte. Dans le cas d'une interface réactive (évaporation), le changement de phase induit une condition de saut supplémentaire : la discontinuité du flux thermique. Il faut reprendre la méthode Ghost Fluid en ajoutant le saut lié au flux thermique :

$$\lambda_l \frac{T_{i+1} - T_\Gamma}{(1 - \theta)dx} - \lambda_g \frac{T_\Gamma - T_i}{\theta dx} = \dot{\omega}_v h_{lv} \quad (5.18)$$

Puis on exprime T_Γ :

$$T_\Gamma = \frac{(1 - \theta)\lambda_g T_i + \lambda_l T_{i+1} - \dot{\omega}_v h_{lv} dx \theta (1 - \theta)}{(1 - \theta)\lambda_g + \theta \lambda_l} \quad (5.19)$$

Notons que le terme saut apparaît clairement dans cette expression, et que l'on retrouve une équation similaire à 5.14. On remplace ensuite l'expression de T_Γ dans l'équation (5.18). Après quelques manipulations, on obtient :

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial x} = \lambda_{Gh} \frac{T_{i+1} - T_i}{dx} - \frac{\dot{\omega}_v h_{lv} (1 - \theta) \lambda_g}{(1 - \theta)\lambda_g + \theta \lambda_l} \quad (5.20)$$

Cette relation nous permet de prendre en compte correctement les discontinuités liées au flux thermique et à la conductivité thermique.

Cependant cette méthode est difficilement applicable aux schémas plus complexe de type WENO par exemple. La méthode Ghost Fluid est principalement employée en utilisant des schémas classiques centré ou décentré. Dans notre cas les variables h_s , U et Y_v étant discontinues et transportées par un schéma WENO, nous ne pouvons pas utiliser directement la méthode Ghost Fluid. Cependant nous avons utilisé une autre

méthode, gardant le même concept, c'est à dire prolonger par continuité les variables discontinues dans des cellules dites "Ghost".

5.2.2 Extrapolation d'ordre élevée

Pour pouvoir prolonger par continuité les variables discontinues avec des schémas complexes, on utilise la méthode d'extrapolation d'Aslam [105]. Celle-ci consiste à propager suivant la normale les variable discontinues dans des cellules Ghost de part et d'autre de l'interface.

Prenons une variable A définit uniquement dans le gaz que l'on souhaite extrapoler dans le liquide. L'interface est représentée par la fonction Level Set, permettant de différencier les phases. Par conséquent on peut délimiter la zone où l'on souhaite extrapoler : $G > 0$ dans l'exemple présenté ici. On utilise la fonction d'Heaviside pour discriminer les phases : $H(G) = 1$ si $G > 0$ et 0 sinon. L'extrapolation d'Aslam se fait suivant la normale \mathbf{n} .

Pour réaliser une extrapolation constante, il faut résoudre l'équation aux dérivées partielles suivante pour $G > 0$:

$$\frac{\partial A}{\partial t} + H(G)\mathbf{n} \cdot \nabla A = 0 \quad (5.21)$$

Aslam propose de résoudre cette équation de manière itérative. Pour ce faire, on utilise un temps fictif pour propager l'information, une estimation du résidu est effectuée à chaque sous itération, jusqu'à obtenir un état stationnaire (dérivée de A nulle dans le liquide).

Il est possible d'augmenter l'ordre de l'extrapolation de manière simple en estimant cette fois la dérivée première nulle, ce qui est équivalent à une extrapolation constante de la dérivée :

$$\frac{\partial A_n}{\partial t} + H(G)\mathbf{n} \cdot \nabla A_n = 0 \quad (5.22)$$

L'indice n de l'expression A_n signifie la dérivée première suivant la normale de la variable A : $A_n = \mathbf{n} \cdot \nabla A$. Une fois A_n obtenu, on résoud de la même manière que pour l'extrapolation constante en rajoutant un terme source pour prendre en compte la dérivée A_n :

$$\frac{\partial A}{\partial t} + H(G)(\mathbf{n} \cdot \nabla A - A_n) = 0 \quad (5.23)$$

Une illustration est présentée en Figure 5.2 pour illustrer l'extrapolation constante et linéaire dans le cas monodimensionnel. Remarquons qu'il est relativement simple

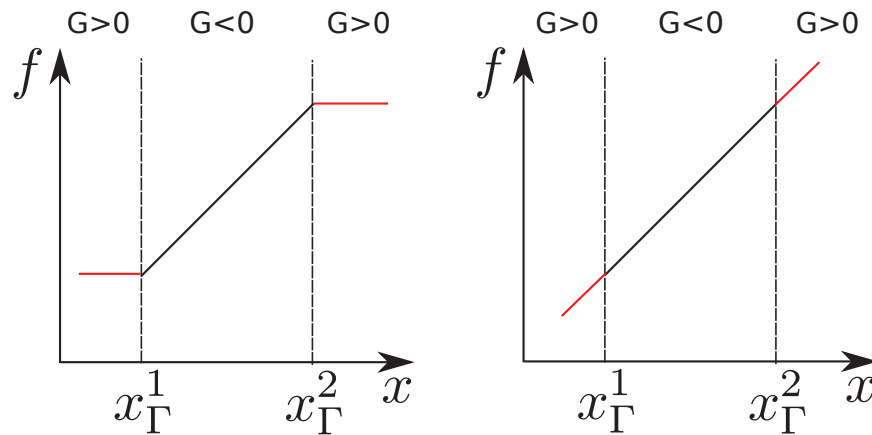


FIGURE 5.2 – Schéma représentant la méthode d'extrapolation dans le cas monodimensionnel. En trait plein noir : f est la fonction que l'on cherche à extrapoler, en trait plein rouge : le résultat de l'extrapolation. x_Γ représente la position de l'interface. A gauche : extrapolation constante, à droite : extrapolation linéaire.

d'augmenter l'ordre de l'extrapolation, puisqu'il suffit de trouver les dérivées correspondant à l'ordre souhaité. Mais cela a une influence sur la stabilité de l'extrapolation. De plus, cela augmente aussi de manière conséquente le temps de calcul, déjà important car la méthode d'extrapolation est itérative. Par conséquent, nous avons choisi de garder une extrapolation linéaire (ordre 1). Les dérivées spatiales sont résolues à l'aide d'un schéma décentré d'ordre 1. Ce choix est motivé par des questions de stabilité : si on résoud à l'ordre 2 l'extrapolation pour des structures liquides très fines de l'ordre d'une maille, l'extrapolation risque de ne plus converger car le nombre de point est insuffisant pour estimer correctement une dérivée. Il se passe un phénomène similaire lors d'un phénomène de rupture ou de coalescence. Notons qu'une telle structure est déjà insuffisamment résolue dans le code ARCHER standard sans modifier de façon flagrante l'écoulement global, mais qu'ici une divergence de l'extrapolation peut avoir un impact important sur la variable extrapolée : valeur aberrantes ou oscillantes. Dans le cas de l'enthalpie on peut noter un chauffage ou un refroidissement totalement numérique si on garde des dérivées à l'ordre 2.

Nous avons ajouté et testé plusieurs schémas d'intégration temporelle (SSPRK43, RK3, Euler explicite) pour la résolution de l'extrapolation. Le schéma SSPRK43 est plus rapide que le RK3 classique, ce qui était attendu (1.5 fois plus rapide en moyenne), pour un résultat à l'ordre 3. Cependant nous avons finalement opté pour un schéma Euler explicite, principalement pour des raisons de temps de calcul. En effet, l'extrapolation est très coûteuse, par conséquent utiliser un schéma à trois étapes comme le Runge

Kutta rajoute encore du temps de calcul. De plus, comme nous itérons jusqu'à atteindre l'état stationnaire, la précision du schéma n'est pas un critère de première importance, car cela se traduit généralement par quelques sous itérations supplémentaires pour obtenir la même précision que les schémas Runge Kutta. Concernant la stabilité, aucun problème n'a été rencontré en utilisant le schéma Euler explicite. Cependant les schémas SSPRK43 et RK3 sont toujours disponibles dans le code, si une intégration temporelle plus robuste est nécessaire. Cette méthode est directement applicable en trois dimensions.

Cette extrapolation est appliquée pour h_s et Y_v pour les termes convectifs, ce qui nous permet d'utiliser les schémas WENO déjà présent dans le code ARCHER. Les extrapolations vont avoir lieu pour l'enthalpie de part et d'autre de l'interface : extrapolation du liquide vers le gaz, et extrapolation du gaz vers le liquide. Y_v n'existant que dans le gaz par définition, nous extrapolons du gaz vers le liquide pour cette variable. Malgré cela, l'extrapolation d' Y_v nécessite un traitement supplémentaire pour prendre en compte la condition de Dirichlet Y_{vs} imposée par l'hypothèse d'équilibre thermodynamique à l'interface.

5.2.3 Application d'une condition limite de dirichlet sur l'interface

La condition limite de Y_v est difficile à appliquer car elle doit être appliquée à l'interface. Notons que dans la méthode originelle de Tanguy [6], les termes de diffusions sont traités de manière implicite, ce qui n'est pas le cas dans notre formalisme. En implicite, il est possible d'utiliser les techniques développées par Gibou et Fedkiw [106] pour appliquer une condition limite de Dirichlet à l'interface. Celle-ci consiste à utiliser des cellules Ghost dans les coefficients de la matrice mais est assez complexe à mettre en place.

Ce problème est assez similaire au concept de frontières immergées, où on utilise des valeurs Ghost pour appliquer une vitesse nulle à la paroi par exemple. C'est dans ce domaine que nous avons trouvé la méthode de Chiu [107], également utilisée dans la thèse d'Emeline Noel [108]. Cette méthode consiste à corriger l'extrapolation obtenue par la méthode d'Aslam pour prendre en compte la condition limite de Dirichlet à l'interface. Dans l'article seule une application à l'ordre 0 est proposée, nous l'avons étendu à l'ordre 1 dans notre formalisme.

La méthode de Chiu utilise un point miroir qui nous permet de corriger la valeur de Y_v dans les cellules Ghost liquide pour que $\frac{\partial Y_v}{\partial x}$ passe par la condition limite Y_{vs} . Dans le cas monodimensionnel avec une interface ponctuelle présenté en Figure 5.3, on peut écrire :

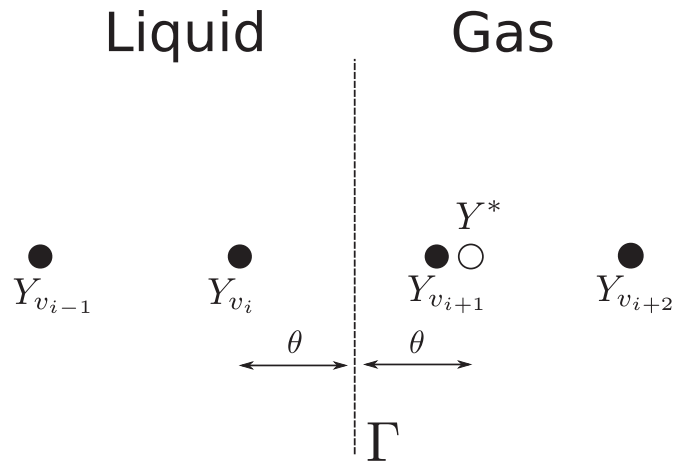


FIGURE 5.3 – Illustration du cas monodimensionnel pour la méthode Aslam-Chiu. ● : points du maillage, ○ : point miroir Y^* .

$$Y^* = \frac{\partial Y_v}{\partial x} 2\theta + Y_{v_i} \quad (5.24)$$

Y^* étant le point miroir du point i séparé d'une distance θ de l'interface. On peut déduire de l'équation précédente des relations entre Y^* et Y_{vs} en discrétisant comme ceci :

$$Y_{v_i} = -\frac{Y_{vs} - Y^*}{dx} \theta + Y_{vs} \quad (5.25)$$

$$Y^* = \frac{Y^* - Y_{vs}}{dx} \theta + Y_{vs} \quad (5.26)$$

On peut réécrire l'équation (5.24) de façon discrète :

$$Y^* = \frac{Y_{v_{i+1}} - Y_{v_i}}{dx} 2\theta + Y_{v_i} \quad (5.27)$$

On somme les expressions (5.25) et (5.26) et on remplace Y^* par l'expression (5.27), ce qui nous donne le $Y_{v_i}^{new}$ corrigé :

$$Y_{v_i}^{new} = 2Y_{vs} - \left(\frac{Y_{v_{i+1}} - Y_{v_i}}{dx} 2\theta + Y_{v_i} \right) \quad (5.28)$$

$Y_{v_i}^{new}$ est donc directement injecté dans les points proches de l'interface côté liquide. On peut réécrire et appliquer le même formalisme en trois dimensions avec une interface représenté par un plan :

$$Y_{v_i}^{new} = 2Y_{vs} - (Y_{v_n} 2\theta + Y_{v_i}) \quad (5.29)$$

Où Y_{v_n} est la dérivée normale déduite de l'extrapolation d'Aslam (équation 5.22). Cette estimation est d'ordre 1, on peut retrouver l'expression à l'ordre 0 en enlevant le terme lié à la dérivée : $Y_{v_i}^{new} = 2Y_{vs} - Y_{v_i}$. Cette méthode est très simple à implémenter : seule une dizaine de lignes de code sont requises.

Malheureusement, il reste une variable discontinue que l'on ne peut pas traiter avec les méthodes mentionnées précédemment (par Ghost Fluid standard ou extrapolation) : la vitesse.

5.2.4 Méthode de projection modifiée pour le saut de vitesse

Le saut de vitesse est une des problématiques les plus difficiles à traiter lorsque l'on étudie l'évaporation. En effet, nous sommes dans un formalisme incompressible, c'est à dire que le champs de vitesse doit être à divergence nulle. Mais on a une création de divergence (flux de masse) à l'interface dûe au phénomène d'évaporation. Il paraît difficilement concevable de garder une méthode de projection identique au code ARCHER standard.

Pour résoudre ce problème, l'idée principale est de reprendre le concept de Ghost Fluid pour l'appliquer au champs de vitesse. Cependant, une contrainte supplémentaire apparaît si on veut rester dans l'hypothèse incompressible : le champs de vitesse et (surtout) son extension par des cellules Ghost doit être à divergence nulle. Par conséquent, les méthodes présentées précédemment ne sont pas adaptées car elle n'assure pas une divergence nulle.

Tanguy [6] propose d'étendre le champs de vitesse en résolvant une pression Ghost qui nous permet d'obtenir des vitesses Ghost à divergence nulle. Nous avons repris la méthode de projection proposée dans cet article.

Les premières étapes de cette méthode de projection sont les même que dans le cas inerte :

- Etape 1 : calcul de \mathbf{U}^* (termes convectifs et diffusifs)
- Etape 2 : calcul du second membre $\nabla \cdot \mathbf{U}^*$
- Etape 3 : résolution de l'équation de Poisson avec les sauts de pression et densité
- Etape 4 : obtention des vitesses dans chaque phase ($\mathbf{U}_l^{n+1}, \mathbf{U}_g^{n+1}$)

A ce stade, nous n'avons pas encore changé la méthode de projection. Pour obtenir des valeurs Ghost dans le gaz, on calcule une pression Ghost :

$$\nabla \cdot \left(\frac{\nabla p_{Gh}}{\rho^{n+1}} \right) = \frac{\nabla \cdot \mathbf{u}_l^*}{dt} \quad (5.30)$$

Notons que le $\nabla \cdot \mathbf{u}_l^*$ est le même qu'à l'étape 2. On peut en déduire les vitesses Ghost dans le gaz :

$$\mathbf{u}_l^{Gh} = \mathbf{u}_l^* - \frac{\nabla p_{Gh}}{\rho^{n+1}} dt \quad (5.31)$$

Ce qui nous permet de peupler les cellules Ghost dans le gaz. On peut rassembler les Ghost présentes dans le gaz et le champs de vitesse dans le liquide pour obtenir le champs complet \mathbf{u}_l^{Gh+l} :

- Si $G > 0$: $\mathbf{u}_l^{Gh+l} = \mathbf{u}_l^{n+1}$
- Sinon : $\mathbf{u}_l^{Gh+l} = \mathbf{u}_l^{Gh}$

Maintenant que l'on a un champs liquide contenant des cellules Ghost à divergence nulle, on peut appliquer la méthode Ghost Fluid de la manière suivante pour ajouter le saut dans les Ghost appartenant à la phase gazeuse :

$$\mathbf{u}_g^{Gh} = \mathbf{u}_l^{Gh+l} - \dot{\omega}_v \left[\frac{1}{\rho} \right] \cdot \mathbf{n} \quad (5.32)$$

Le champs de vitesse gazeux est décomposé de la même façon que pour le liquide :

- Si $G > 0$: $\mathbf{u}_g^{Gh+g} = \mathbf{u}_g^{Gh}$
- Sinon $\mathbf{u}_g^{Gh+g} = \mathbf{u}_g^{n+1}$

Il est important de noter que l'ajout de cellule Ghost dans les deux phases nous oblige à utiliser deux tableaux au lieu d'un pour les vitesses. On aura un tableau dédié à la vitesse liquide contenant les vitesse Ghost dans le domaine gazeux plus les vitesses au sein du liquide. Et un autre dédié à la vitesse gaz contenant les vitesses Ghost dans le domaine liquide plus les vitesses au sein du gaz. Nous insistons sur ce point car cela peut prêter à confusion.

Dans l'article d'origine, il est conseillé de résoudre une autre équation de Poisson pour renforcer la propriété de divergence nulle du champs liquide. Nous l'avons ajouté dans notre formalisme mais la correction apportée semble mineure. Nous l'avons néanmoins conservé dans la suite de ce travail.

Le changement de la méthode de projection dans le code ARCHER a été un travail conséquent. Il faut ajouter aux modifications mentionnées précédemment que la création de deux champs de vitesse (liquide + gaz) implique de nombreuses modifications au sein du programme. Par exemple : duplication des conditions limites, modifications

des schémas convectifs et diffusifs, envoi mpi supplémentaires, ajout d'une résolution de poisson ... De plus, il faut identifier de manière précise à quelle phase appartient les vitesses en utilisant la fonction Level Set, car les points de vitesse ne sont pas situés au même endroit sur la grille que la fonction Level Set.

5.2.5 Régression d'interface

Dans ce chapitre, nous utilisons uniquement la fonction Level Set pour décrire l'interface. En présence d'un changement de phase, l'interface va se déplacer en fonction de la vitesse du liquide et la vitesse de régression due à l'évaporation. Nous avons montré dans la section 5.1.3 que $U_\Gamma = U_l + U_{reac}$, par conséquent l'équation de transport de la Level Set avec évaporation peut s'écrire de la manière suivante (en remplaçant U_Γ et U_{reac} par leur expression respective) :

$$\frac{\partial G}{\partial t} + (\mathbf{U}_l + \dot{\omega}_v \frac{1}{\rho_l} \mathbf{n}) \cdot \nabla G = 0 \quad (5.33)$$

Excepté ce changement, l'équation est résolue de la même manière que dans le cas d'une interface inerte. Notons que le terme $\dot{\omega}_v$ est calculé par la relation (5.9), il est aussi extrapolé avec la méthode d'Aslam pour que le champs Level Set reste continu.

5.3 Validation

Suite à l'implémentation de ces nouvelles variables et méthode numériques, des cas de validations sont nécessaires. Nous les présentons dans cette section.

5.3.1 Validation pour le saut de vitesse : vitesse de regression imposée

Pour valider le saut de vitesse imposée dans l'équation de Navier-Stokes, nous reprenons le cas test présenté dans l'article de Tanguy [6], également présent dans la thèse de Calimez [62].

La configuration est présentée à l'aide d'un résultat de calcul en Figure 5.4. On étudie une goutte sphérique statique se vaporisant à un taux d'évaporation constant ($\dot{\omega}_v = 1 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$). Cela se confirme bien sur la Figure 5.4, les vitesses en fonction du rayon de la goutte sont identiques.

L'intérêt de cette configuration est de découpler le problème de la thermodynamique pour se focaliser sur la dynamique de l'écoulement. La liste des paramètres physiques

pour cette configuration est présentée dans le Tableau 5.2. Notons que dans le cas présenté nous avons volontairement choisi d'avoir peu de points dans la goutte, ceci nous permet de tester efficacement notre méthode et notre convergence en maillage. Les schémas utilisés sont les même que dans la version classique du code : RK3 pour l'intégration temporelle, WENO d'ordre 5 pour les dérivées convectives et un schéma centré d'ordre 2 pour les termes diffusifs.

TABLE 5.2 – Paramètres de la simulation (unités S.I.)

ρ_l	ρ_g	σ	μ_g	μ_l	$\dot{\omega}_v$	R_G	L
1000	1.226	0.07	$1.78 \cdot 10^{-5}$	$1.137 \cdot 10^{-3}$	1	$2 \cdot 10^{-4}$	$6.66 R_G$

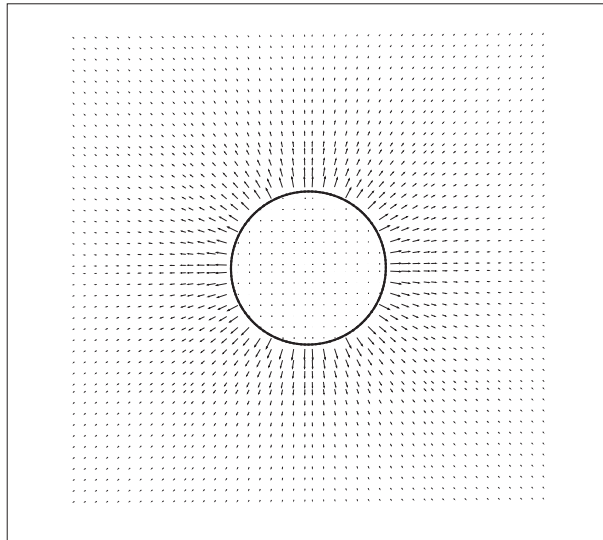


FIGURE 5.4 – Représentation instantanée 2D des vecteurs vitesse pour la configuration à taux d'évaporation constant. Trait plein : interface liquide-gaz.

Ce cas test nous indique si le saut de vitesse est appliqué de manière convenable ou non. L'évolution temporelle de la masse peut être écrite théoriquement dans cette configuration à taux d'évaporation constant :

$$m_{th}(t) = \rho_l \pi (R - U_\Gamma t)^2 \quad (5.34)$$

Il est ainsi possible de comparer nos résultats numériques aux résultats théoriques. Cette comparaison est visible sur la Figure 5.5. On remarque que nous avons une bonne convergence en maillage, plus le maillage est fin, plus on se rapproche de la solution théorique. On peut également vérifier l'ordre de la méthode en traçant différentes normes L_p . Les normes présentées ici sont calculées pour cinq maillages différents de

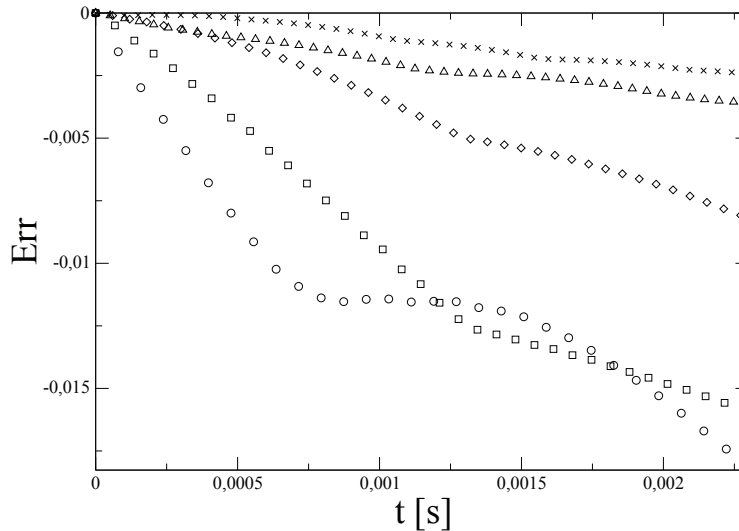


FIGURE 5.5 – Erreur en fonction du temps ($Err = m_{th}(t) - m(t)$) pour cinq maillages différents. \circ : maillage 32^3 , \square : 48^3 , \diamond : 64^3 , \triangle : 96^3 et \times : 128^3

la manière suivante : $L_\infty = \max|m_{th}(t) - m(t)|$, $L_1 = \frac{\sum|m_{th}(t)-m(t)|}{N}$, $L_2 = \frac{\sum|m_{th}(t)-m(t)|^2}{N}$. N étant le nombre d'échantillons. Ces résultats sont présentée sur la Figure 5.6 on remarque que l'ordre de la méthode est située entre l'ordre 2 et 3.

La mauvaise convergence entre les maillages 32^3 et 48^3 s'explique par le temps de simulation assez court imposé par le maillage 128^3 . En effet, nous nous sommes limités à un temps final de $2.3E-03$ pour limiter le temps de calcul du maillage le plus raffiné. La convergence entre les maillages 32^3 et 48^3 est meilleure après le temps final, on peut voir que le maillage 48^3 redevient intéressant lorsque t approche le temps final sur la Figure 5.5.

On retrouve donc un ordre similaire aux résultats de l'article de Tanguy, ce qui valide la méthode de projection utilisée pour la prise en compte du saut de vitesse.

5.3.2 Validation de la thermodynamique : Loi du D^2

Pour valider la thermodynamique, nous nous basons sur un des rares résultats théoriques disponibles sur le phénomène d'évaporation : la loi du D^2 . Nous la décrivons de façon théorique puis nous la comparons avec nos résultats numériques dans cette section.

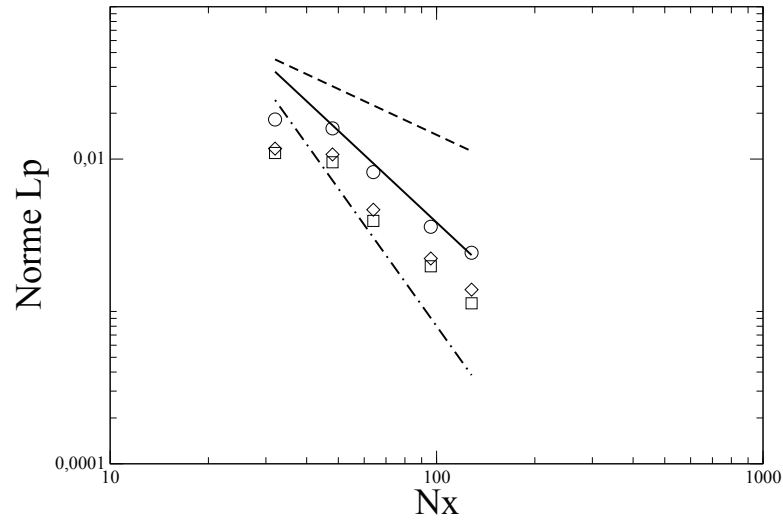


FIGURE 5.6 – Vérification de l’ordre global de la méthode à l’aide d’une convergence en maillage. \circ : norme L_∞ , \square : norme L_1 , \diamond : norme L_2 . Tirets : ordre 1, trait plein : ordre 2, tirets points : ordre 3.

5.3.2.a Hypothèses et théorie

On considère une goutte statique au repos de diamètre R_G s’évaporant dans un milieu infini, respectant les hypothèses suivantes :

- Symétrie sphérique
- Equilibre thermodynamique à l’interface liquide-gaz
- Pas de gradient thermique au sein du liquide (Température T_l constante et uniforme)
- Liquide monocomposant
- Pression constante dans le milieu considéré
- Gaz à l’état quasi stationnaire (les caractéristiques du gaz s’adaptent très rapidement comparativement à celles du liquide)

La principale difficulté est le fort couplage entre les transferts de chaleur et de masse. Pour réaliser les calculs théoriques, nous sommes basés en partie sur le livre de Borghi [109].

Énonçons les conditions limites du problème : T_Γ est la température à l’interface, Y_{vs} est donné par la loi de Clausius-Clapeyron (dépend de T_Γ), T_∞ est la température à l’infini et $Y_{v\infty}$ est la fraction massique de vapeur à l’infini

En écrivant la conservation de la masse global en géométrie sphérique :

$$\frac{d}{dt}(4\pi r^2 \rho U) = 0 \quad (5.35)$$

Par conséquent en intégrant on obtient $4\pi r^2 \rho U = \text{constante} = \dot{m}$, \dot{m} étant le débit massique de gaz.

On peut écrire la conservation de masse de l'espèce Y_v :

$$\frac{d}{dr}(4\pi r^2 \rho U Y_v) = \frac{d}{dr}(4\pi \rho D_m r^2 \frac{dY_v}{dr}) \quad (5.36)$$

En remplaçant par \dot{m} :

$$\frac{d}{dr}(\dot{m} Y_v) = \frac{d}{dr}(4\pi \rho D_m r^2 \frac{dY_v}{dr}) \quad (5.37)$$

On intègre et on fait la différence des deux termes :

$$\dot{m} Y_v - 4\pi \rho D_m r^2 \frac{dY_v}{dr} = \text{constante} \quad (5.38)$$

Proche de l'interface, le flux de vapeur est forcément égal au débit massique de vapeur libéré par le liquide, par conséquent on obtient une nouvelle condition limite :

$$\dot{m} Y_{vs} - 4\pi \rho D_m R_G^2 \frac{dY_v}{dr} = \dot{m} \quad (5.39)$$

En remplaçant la constante par sa valeur dans l'équation (5.38), en isolant Y_v et en intégrant une nouvelle fois on obtient :

$$\ln(Y_v - 1) = -\frac{\dot{m}}{4\pi \rho D_m r} + \text{constante} \quad (5.40)$$

En utilisant la condition limite à l'infini $Y_v = Y_{v\infty}$, on obtient finalement l'évolution radiale de Y_v :

$$Y_v(r) = 1 + (Y_{v\infty} - 1) \exp^{-\frac{\dot{m}}{4\pi \rho D_m r}} \quad (5.41)$$

Grâce à cette relation on peut également trouver une relation nous donnant \dot{m} en utilisant la condition limite à l'interface Y_{vs} :

$$\dot{m} = -4\pi \rho D_m r \ln\left(\frac{Y_{vs} - 1}{Y_{v\infty} - 1}\right) \quad (5.42)$$

En fonction des inconnues du problèmes (soit Y_{vs} ou \dot{m}), on peut ainsi trouver les valeurs de \dot{m} et de $Y_v(r)$.

On peut appliquer un raisonnement similaire pour obtenir le profil radial de température. En faisant un bilan d'énergie, on obtient :

$$\frac{d}{dr}(\dot{m}T) = \frac{d}{dr}(4\pi\rho D^t r^2 \frac{dT}{dr}) \quad (5.43)$$

Où D^t est le coefficient de diffusion thermique ($D^t = \frac{\lambda}{\rho C_p}$).

On intègre :

$$\dot{m}T - 4\pi\rho D^t r^2 \frac{dT}{dr} = \text{constante} \quad (5.44)$$

On a besoin de la condition limite à l'interface :

$$\dot{m}T \Big|_g - 4\pi\rho D_g^t r^2 \frac{dT}{dr} \Big|_g = \frac{\dot{m}h_{lv}}{C_p} \underbrace{-4\pi\rho D_l^t r^2 \frac{dT}{dr} \Big|_l + \dot{m}T \Big|_l}_{\varphi_l} \quad (5.45)$$

Cette équation est un peu plus complexe que pour la fraction massique de vapeur car nous avons également présence d'un flux dans le liquide, ainsi que l'énergie absorbée par le changement de phase. Dorénavant, nous utiliserons φ_l pour représenter le flux thermique liquide (pour une meilleure lisibilité).

En utilisant la condition limite à l'interface puis en intégrant, on obtient :

$$\ln\left(T - \frac{h_{lv}}{C_p} - \frac{\varphi_l}{\dot{m}}\right) = -\frac{\dot{m}}{4\pi\rho D_g^t r} + \text{constante} \quad (5.46)$$

En utilisant la condition limite à l'infini, on obtient finalement notre profil radial de température :

$$\ln\left(\frac{T(r) - \frac{h_{lv}}{C_p} - \frac{\varphi_l}{\dot{m}}}{T_\infty - \frac{h_{lv}}{C_p} - \frac{\varphi_l}{\dot{m}}}\right) = -\frac{\dot{m}}{4\pi\rho D_g^t r} \quad (5.47)$$

Notons que φ_l n'est pas forcément connu, on peut le déduire de la relation précédente en se plaçant à l'interface :

$$\varphi_l = -\frac{\dot{m}(h_{lv} + \exp^{-\frac{\dot{m}}{4\pi\rho D_g^t r}}(T_\infty C_p - h_{lv}) - T_\Gamma)}{C_p(1 - \exp^{-\frac{\dot{m}}{4\pi\rho D_g^t r}})} \quad (5.48)$$

L'ensemble de ces équations va nous permettre de résoudre théoriquement les profils de température et de fraction massique de vapeur. Notons que dans notre configuration numérique, le domaine n'est pas infini. Par conséquent, on peut intégrer de nouvelles conditions limites aux frontières du domaine de longueur r_{lim} : $Y_v(r_{lim}) = Y_{vlim}$ et $T(r_{lim}) = T_{lim}$. Les équations précédentes deviennent :

$$\dot{m} = -4\pi\rho D_m \frac{r r_{lim}}{r_{lim} - r} \ln\left(\frac{Y_{vs} - 1}{Y_{vlim} - 1}\right) \quad (5.49)$$

$$Y_v(r) = 1 + (Y_{vlim} - 1) \exp\left(-\frac{\dot{m}}{4\pi\rho D_m} \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{r_{lim}}\right)\right) \quad (5.50)$$

$$\ln\left(\frac{T(r) - \frac{h_{lv}}{C_p} - \frac{\varphi_l}{\dot{m}}}{T_{lim} - \frac{h_{lv}}{C_p} - \frac{\varphi_l}{\dot{m}}}\right) = -\frac{\dot{m}}{4\pi\rho D_g^t} \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{r_{lim}}\right) \quad (5.51)$$

Où l'indice lim signifie la valeur de la variable considérée aux frontières du domaine, considéré sphérique.

5.3.2.b Comparaison entre simulation et théorie

Pour comparer ces deux résultats, nous utilisons la configuration numérique présentée dans le Tableau 5.3 (goutte d'eau statique dans de l'air au repos). Notons que cette configuration est assez difficile à traiter, malgré son apparente simplicité. Comme nous l'avons indiqué dans la section précédente, la configuration a un domaine fini mais elle est également non sphérique puisque nous utilisons un code cartésien. Par conséquent des effets de bord peuvent altérer la solution numérique. De plus, traiter une goutte statique dans un code avec un suivi d'interface pose déjà des problèmes sans évaporation : des courants parasites apparaissent principalement à cause du saut de pression à l'interface. Ces courants parasites peuvent, à long terme, perturber l'écoulement dans le cas d'une goutte statique car ils peuvent s'accumuler à chaque itération (les points concernés restent les mêmes au cours de la simulation). Dans les applications standards l'effet des courants parasites est négligeable devant le mouvement du gaz et du liquide.

TABLE 5.3 – Paramètres de la simulation (unités S.I.)

D_m	D_g^t	D_l^t	σ	μ_g
2.10^{-5}	$3.75.10^{-5}$	$1.44.10^{-7}$	0.07	$1.78.10^{-5}$
μ_l	T_{init}^l	T_{init}^g	R_G	L
$1.137.10^{-3}$	353	873	$1.5.10^{-4}$	$1.2.10^{-3}$

Dans le cas de l'évaporation, ce problème est accru : l'évaporation peut, en fonction des conditions thermodynamiques, imposer une vitesse de régression d'interface de l'ordre de grandeur des courants parasites. Malgré cela, étant donné que les courants parasites s'atténuent en raffinant le maillage, il est possible de maintenir un

ou plusieurs ordres de grandeurs entre la vitesse de régression et les courants parasites, donc notre méthode reste intéressante. De plus, rappelons que l'accumulation d'erreur est nettement moins présente dans le cas d'une goutte mobile (pas d'accumulation d'erreur sur les même points).

Pour vérifier la loi du D^2 , on utilise généralement directement l'évolution temporelle du diamètre pour valider la méthode [6]. Cependant, cette loi est déduite des relations énoncées dans la section précédente, par conséquent si nous avons les bons profils de température et d'espèce, la loi du D^2 est vérifiée. Cette approche nous paraît plus complète, car l'évaporation entière de la goutte est très coûteux en temps de calcul, et plus le temps de simulation est long, plus les courants parasites influencent l'écoulement. En vérifiant les profils de température et d'espèce directement, nous validons cette loi plus rapidement et de façon plus précise (informations sur les gradients de T et Y_v), tout en réduisant de manière conséquente l'influence des courants parasites. Pour limiter l'influence des courants parasites, nous nous sommes placés dans un cas à haute température pour obtenir un taux d'évaporation important : une goutte froide dans de l'air chaud au repos. Une visualisation du champs de température est disponible en Figure 5.7. On visualise également des échelles de temps de diffusion très différentes entre le liquide (faible gradient de température) et le du gaz (fort gradient de température).

A l'aide des relations (5.50) et (5.51) exposées précédemment, nous avons comparé les approches théoriques et numériques en Figure 5.8. Notons que les conditions limites à l'interface T_Γ et Y_{vs} utilisées par la théorie sont donnés par les résultats numériques.

On retrouve un très bon accord avec la théorie malgré l'influence des coins et un maillage relativement grossier : 64^3 dans l'ensemble du domaine, soit seulement une vingtaine de points dans la phase gazeuse (écoulement symétrique). Il nous paraît peu judicieux de calculer l'ordre de la méthode avec cette comparaison, principalement à cause du biais crée par la non sphéricité du domaine. Néanmoins, cette validation nous démontre que la thermodynamique a été intégrée et couplée avec les équations de Navier Stokes de manière satisfaisante pour résoudre l'évaporation.

5.3.3 Evaporation d'une goutte déformée en mouvement

Cette configuration nous permet de vérifier la robustesse de notre méthode et de la comparer avec les résultats obtenus par Tanguy et al. On place une goutte de diamètre $600 \mu m$ initialement sphérique en haut du domaine puis on impose une vitesse de 1 m/s au sein de la goutte, sa température est initialement à $373^\circ K$ et le gaz est à une

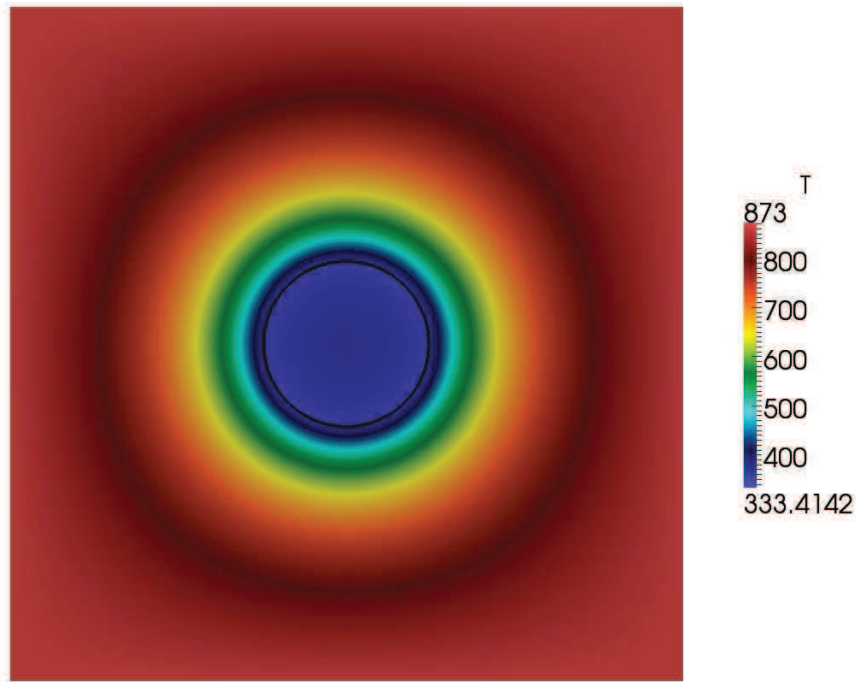


FIGURE 5.7 – Visualisation du champs de température (coupe centrale) à l'instant $t = 0.525 \cdot 10^{-2} s$. L'isocontour noire représente l'interface liquide-gaz.

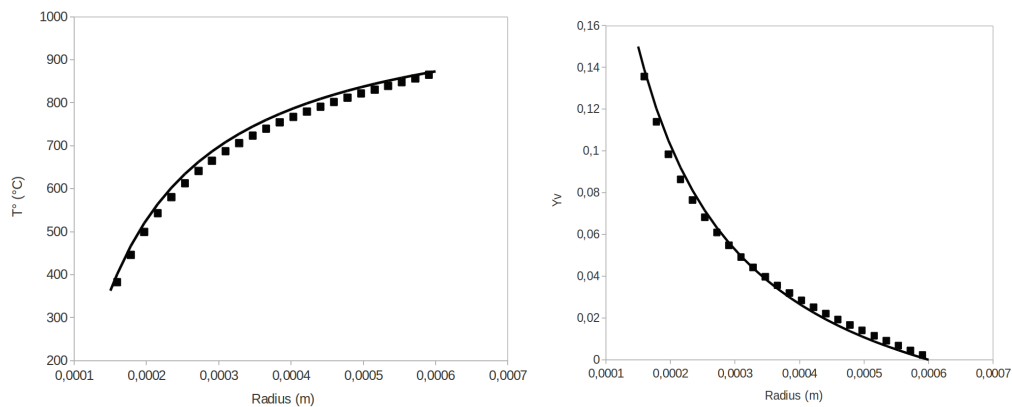


FIGURE 5.8 – Température et fraction massique de vapeur dans la phase gazeuse en fonction du rayon de la goutte à l'instant $t = 0.525 \cdot 10^{-2} s$. Trait plein : solution théorique. Symboles : résultats de la simulation (maillage 64^3).

température de $873^{\circ}K$. Un maillage $64 \times 64 \times 256$ ainsi que des conditions limites libres sont utilisés. L'évolution temporelle du champs de température est présentée en Figure 5.9 et une visualisation du champs de vapeur et du taux de réaction à l'instant final est disponible en Figure 5.10. La goutte descend et laisse dans son sillage une "plume" de vapeur produite par évaporation. L'évaporation est plus forte devant la goutte à cause du très important gradient de température et d'espèces. Contrairement à l'arrière de la goutte qui s'évapore plus lentement car les gradients sont moins raides (voir Figure 5.10).

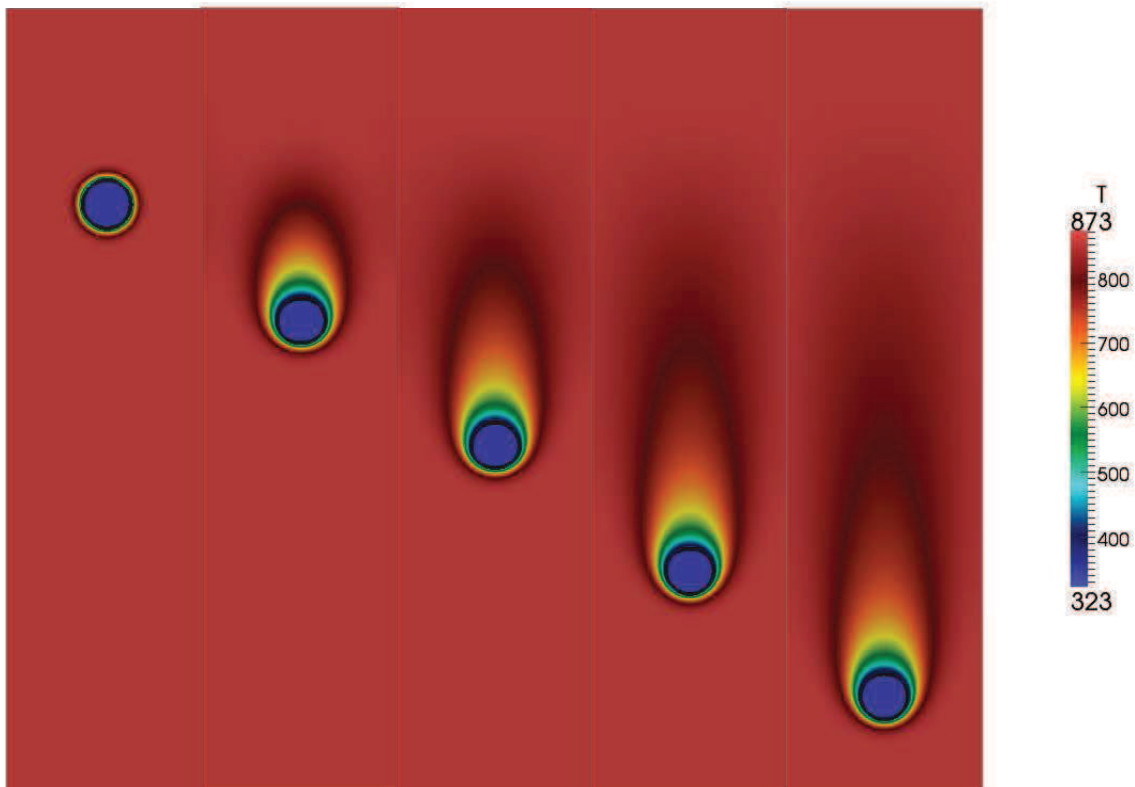


FIGURE 5.9 – Champs de température à cinq instants successifs. L'isocontour noire correspond à l'interface liquide-gaz.

On peut également regarder le champs de température à l'intérieur de la goutte (voir Figure 5.11). On remarque que la goutte se réchauffe principalement à l'arrière de la goutte à cause de la recirculation présente derrière la goutte. La température

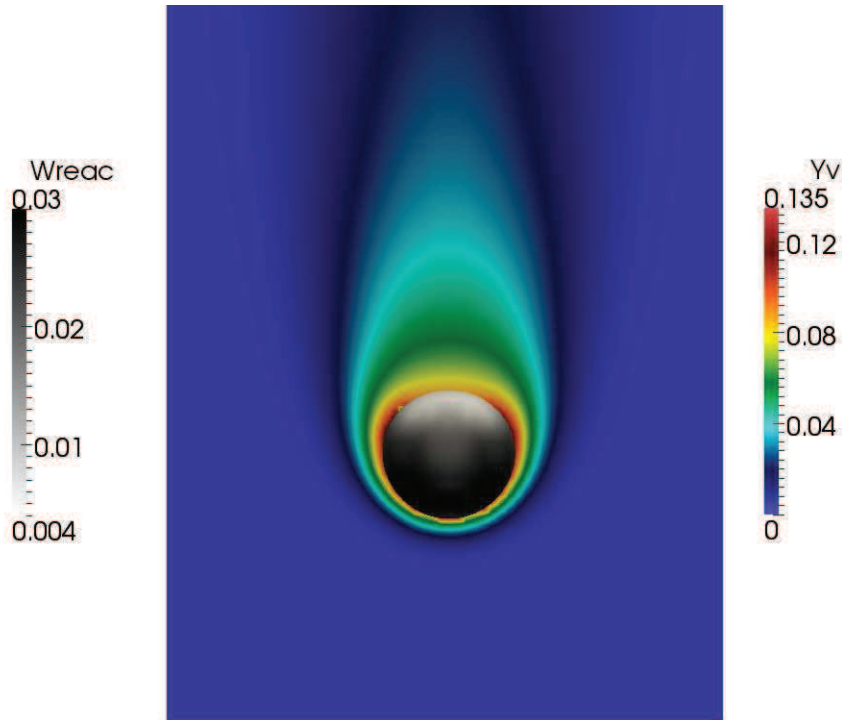


FIGURE 5.10 – Visualisation 2D du champs de fraction massique de vapeur et de l'interface colorée par le taux d'évaporation à l'instant final.

n'est clairement pas homogène dans cette configuration. Malheureusement, le profil de température n'est pas très bien décrit à cause du maillage utilisé (trop grossier). Cependant nous retrouvons un profil assez similaire aux résultats de Tanguy qui utilise un maillage beaucoup plus fin en 2D axisymétrique (64x512).

5.4 Conclusion et perspectives

Dans ce chapitre, nous avons montré notre formalisme pour résoudre l'évaporation. Principalement basé sur la méthode Ghost Fluid, cette méthode a été capable de prendre en compte l'évaporation de manière très satisfaisante. Elle a été validé intensivement à l'aide de résultats théoriques et a été suffisamment robuste pour supporter des configurations à fort gradient de température. De nouveaux outils ont été ajoutés au sein du code de calcul tel que l'extrapolation d'Aslam, les équations de transport

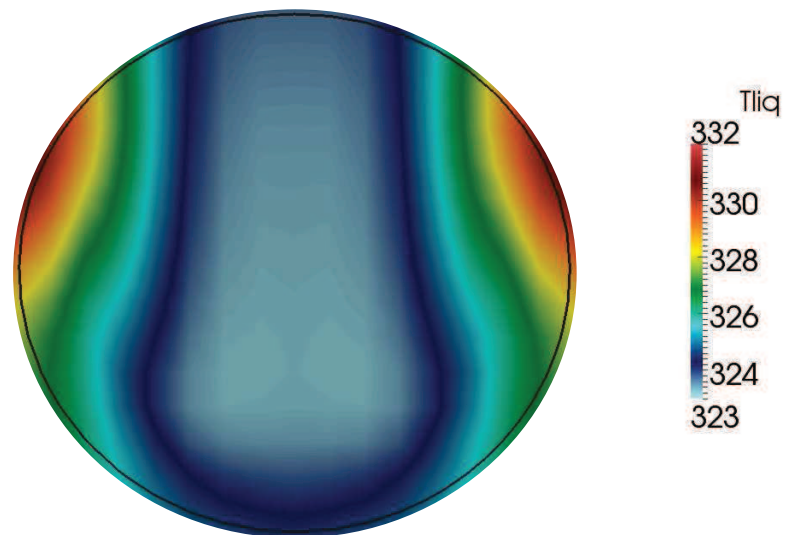


FIGURE 5.11 – Champs de température au sein de la goutte (initialement à 323 °K). L'isocontour noire correspond à l'interface liquide-gaz.

de l'enthalpie et des espèces, ainsi que la possibilité d'ajouter des conditions limites à l'interface de façon simple. Cette méthode nous semble très prometteuse et nous souhaitons poursuivre le développement de celle-ci à l'avenir car il reste quelques points délicats à étudier.

Conclusion finale et perspectives

Conclusion finale

L'objectif principal de cette thèse est de mieux comprendre les écoulements diphasiques denses inertes ou lié à la vaporisation.

Nous avons tout d'abord introduit le contexte de l'étude en rappelant l'importance de la prédiction des émissions de polluants au sein des moteurs automobiles. Pour cela, un des moyens les plus efficaces est une meilleure répartition de la vapeur du carburant dans la chambre de combustion. L'analyse des processus physiques tels que l'atomisation, l'évaporation et du mélange du carburant nous permet d'améliorer les performances moteurs. Nous nous focalisons sur ces trois aspects dans ce manuscrit. Ensuite nous évoquons l'état de l'art sur l'atomisation et l'évaporation et nous remarquons que peu d'études combinent une méthode de suivi d'interface et la prise en compte du processus d'évaporation. Ceci s'explique par la récence des méthodes de suivi d'interface, il reste encore des développements importants à faire dans ce domaine (couplage interface-Navier Stokes difficile). De plus, la prise en compte de l'évaporation apporte une complexité supplémentaire. Ce manque d'étude nous motive pour aller plus loin dans la compréhension du processus d'évaporation. Nous nous intéressons également à la turbulence au sein d'un milieu diphasique et nous remarquons que très peu d'études existent à l'heure actuelle. Il existe des études de jets turbulent diphasique mais elles ne nous permettent pas d'analyser de façon simple l'influence de la turbulence sur l'interface.

C'est pourquoi nous avons proposé et étudié une simulation d'un écoulement turbulent homogène isotrope diphasique. Celle-ci soulève de nombreuses questions sur les interactions entre turbulence et l'interface : quels sont les outils permettant d'analyser ses interactions ? Dans cette thèse, nous avons utilisé les outils standards pour analyser la turbulence : les fonctions de structure, l'étude des spectres d'énergie cinétique turbulente et le calcul de la dissipation turbulente. En pratique, au delà de l'écoulement complet, on peut différencier la turbulence dans le liquide, dans le gaz et à

l'interface. Ces outils nous ont permis de valider et d'évaluer l'influence du diphasique au sein d'une turbulence homogène isotrope : la dissipation d'énergie cinétique turbulente moyenne est accrue par la présence de liquide et on remarque que localement la proximité d'une interface augmente de façon significative la dissipation. Cependant, la question de l'applicabilité des outils standard d'analyse de la turbulence et de la validité de la théorie de Kolmogorov dans un milieu diphasique dense reste ouverte.

Une méthode de forçage linéaire basée sur les travaux de Rosales et Meneveau [77] et adaptée pour le diphasique a été mise en oeuvre pour entretenir la turbulence au sein de la boîte périodique. Ce forçage a été validé à l'aide des résultats de Rosales et Meneveau pour une configuration THI monophasique similaire. Nous observons un comportement satisfaisant du code ARCHER : pour un forçage donné nous retrouvons la même valeur pour l'énergie cinétique turbulente moyenne ainsi qu'un comportement similaire.

Une autre validation a également été effectuée pour vérifier la précision du code ARCHER en monophasique, nous avons constaté que l'utilisation d'un schéma WENO 5 introduit une légère dissipation numérique qui reste maîtrisable pour qu'elle n'altère pas les résultats. Nous avons également mis en avant la difficulté d'obtenir une convergence en maillage dans les cas diphasiques, nous rappelant que la détermination de l'échelle la plus fine dans un écoulement diphasique reste inconnue à l'heure actuelle. Cependant, on observe une convergence statistique en fonction des maillages utilisés, ce qui nous permet d'extraire des informations fiable de nos simulations. Cette configuration permet d'étudier un écoulement diphasique simplifié : la turbulence et la quantité de liquide sont maîtrisés, ce qui n'est pas le cas dans une configuration de jet par exemple.

Cette étude sur la turbulence et les différentes validations effectuées nous confortent dans l'idée d'utiliser cette configuration THI diphasique pour améliorer et valider le modèle ELSA initialement proposé par Vallet et Borghi. Ce modèle consiste à utiliser une équation de transport pour la densité d'interface moyennée définie par le ratio entre la surface de l'interface liquide-gaz et le volume de la cellule considérée. A l'aide de statistiques sur les quantités interfaciales (notamment la densité d'interface liquide-gaz) de l'écoulement nous comparons les résultats DNS et ceux du modèle ELSA. Ces statistiques ont été effectuées en réalisant des moyennes d'ensembles sur un très grand nombre d'échantillons : en partant d'un calcul DNS de référence à une quantité de liquide donnée (5% par exemple), on réalise de multiples reprises de calcul séparé d'un temps suffisamment grand pour décorréler les résultats. On modifie la tension de surface pour imposer un régime de rupture (diminution de la tension de surface), ou de coalescence (augmentation de la tension de surface). Il est ainsi possible d'étudier ces

deux régimes d'atomisation (rupture et coalescence). L'intérêt de cette étude est d'extraire la valeur moyenne de la densité d'interface et son évolution temporelle à partir des calculs DNS pour la comparer au modèle ELSA une fois les constantes de modélisation déterminées. Les résultats de la DNS et du modèle sont très proches, ce qui est une avancée importante car le terme du modèle ELSA que nous étudions n'a jamais été vérifié auparavant. Nous proposons une amélioration pour que le modèle apporte une meilleure prédiction sur l'évolution temporelle de la densité d'interface moyenne.

La configuration THID est également reprise pour l'étude de l'évaporation et du mélange à l'aide d'un scalaire passif. Le scalaire obéit à une équation de transport avec une condition limite à l'interface, ce scalaire va ensuite être transporté et diffusé dans le gaz. L'étude est menée sur une large gamme de fraction volumique de liquide (de 1% à 99%) pour étudier l'influence de la quantité de liquide sur le mélange du scalaire. La résolution des couches limites de fraction de mélange proche interface est la principale différence avec les études précédentes. En effet, celles-ci ne résolvent pas les couches limites puisqu'elles se placent généralement dans des cas diphasiques dispersés où la vapeur libérée est issue de gouttellettes sphériques représenté par des particules lagrangiennes beaucoup plus petites que les mailles de calcul. L'influence de ces couches limites est notable sur les fonctions de probabilités de la fraction de mélange : on observe une PDF bimodale avec un premier pic autour de la moyenne du scalaire et un second pic proche de la valeur prise par le scalaire à l'interface. Ce second pic est issue de la résolution des couches limites. Par conséquent, les fonctions de probabilités obtenues sont différentes des β -PDF utilisées fréquemment en combustion pour représenter le mélange du scalaire. Dans notre étude nous confrontons les PDF "réelles" obtenues à l'aide de la DNS avec les β -PDF construites à l'aide de la moyenne et de la variance de la fraction de mélange. Cette étude confirme que les formes de β -PDF utilisées habituellement en combustion doivent être adaptées pour caractériser le mélange dans un spray dense. Cette étude est également une des rare à prendre en compte l'évaporation d'un spray dense turbulent à l'aide d'une méthode de suivi d'interface.

L'étude de l'évaporation par un scalaire passif est la première étape vers la résolution de l'évaporation. Pour améliorer la prise en compte de ce processus, nous utilisons un formalisme direct pour résoudre l'évaporation en se basant sur l'article de Tanguy et al [6]. Des équations supplémentaires sont ajoutées au sein du code ARCHER pour prendre en compte l'évaporation. Il est nécessaire de résoudre l'enthalpie sensible et la fraction massique de vapeur. Ces équations présente des discontinuités à l'interface (conditions de saut) inhérentes au phénomène d'évaporation, nous les présentons et proposons une stratégie pour résoudre numériquement ce problème.

Cette stratégie consiste à combiner différentes méthodes numériques pour prendre en compte les conditions de sauts. Pour résoudre les termes convectifs des variables discontinues, nous utilisons l'extrapolation d'Aslam [105] qui consiste à prolonger le gradient normal à l'interface. Sans cette méthode, le transport d'une variable discontinue va provoquer des instabilités numériques importantes. Une amélioration de cette méthode, basé sur l'article de Chiu et al [107], permet d'appliquer une condition limite de Dirichlet à l'interface à l'ordre zéro. Nous avons amélioré la méthode originelle en augmentant d'un ordre la précision. Cette méthode est utilisée pour appliquer la fraction massique de vapeur saturante à l'interface. La méthode Ghost Fluid a été utilisée pour prendre en compte le saut du flux thermique à l'interface, ainsi que le saut de la conductivité thermique. Enfin, une nouvelle méthode de projection a été intégrée au code ARCHER pour prendre en compte le saut de vitesse. Elle consiste à étendre les vitesses liquides et gaz tout en respectant la condition de divergence nulle. Notons que l'évaporation est un problème assez difficile à résoudre numériquement car il couple les transferts thermiques, les transferts de masse et la régression d'interface. Ces méthodes ont ensuite été validées sur plusieurs cas tests à l'aide de résultats théoriques comme la loi du D^2 , montrant la précision et l'intérêt de notre méthode. Nous présentons également un cas plus réaliste d'une goutte froide qui tombe dans un gaz chaud au repos, on remarque que la goutte se vaporise plus à l'avant qu'à l'arrière ce qui provoque une légère déformation. On peut également observer un gradient de température au sein du liquide, c'est une information rarement disponible dans les études traitant l'évaporation (comme la déformation de la goutte). Cette technique est très prometteuse malgré un coût de calcul important. Le phénomène d'évaporation est rarement traité avec les méthodes de suivi d'interface de façon précise dans la littérature.

Perspectives

Maintenant que notre configuration THI diphasique est bien validée et établie, il serait intéressant d'enrichir notre base de données DNS de référence pour étudier les modèles dédiés à l'atomisation primaire. Cette configuration nous paraît idéale pour créer des modèles LES dédiés à l'atomisation, ceux-ci pourront être confrontés à la base de données DNS que nous avons réalisée. Un autre aspect intéressant est de mieux comprendre les interactions turbulence/interface, la littérature étant très pauvre sur ce sujet, notre configuration pourrait permettre d'analyser plus finement la région proche interface. Une étude DNS combinée avec une étude théorique pourrait permettre la

détermination de la plus petite échelle d'un écoulement diphasique. Cela représenterait une avancée majeure dans le domaine de l'atomisation.

Une nouvelle méthode de forçage a été développée et implémentée dans le code Archer pour forcer uniquement suivant une gamme d'échelle. L'idée est de créer des zones réduites de forçage réparties de façon homogène et isotrope dans la configuration THI, la dimension de ces zones impose l'échelle intégrale et une gamme d'échelles de la turbulence. La zone d'étude se trouve au centre, loin des zones de forçage. Cela permet de diminuer le bruit créé par le forçage lors des analyses statistiques. On peut espérer des simulations moins longues car la convergence statistique devrait s'effectuer plus rapidement, l'influence du forçage étant diminuée. De plus cette configuration se prête bien au calcul parallèle. L'implémentation de cette méthode nous permet également de faire un forçage localisé dans n'importe quelle zone du domaine par un système de marquage, ce qui peut être utile dans d'autres configurations numériques. La poursuite de ces travaux permettrait de mieux comprendre l'influence du forçage et de déterminer si ce nouveau forçage est plus intéressant que le précédent.

Concernant le travail réalisé sur la fraction de mélange, il continue d'être valorisé en collaboration avec l'équipe combustion du laboratoire P' (Poitiers). Cette équipe est fortement intéressée par l'évolution de la dissipation scalaire au sein d'un écoulement diphasique dense, car il n'y a que très peu d'études sur le sujet. Dans notre étude, nous avons étudié uniquement les propriétés de la fraction de mélange Z , l'étude de la dissipation scalaire est la suite directe de ce travail. Cela permettra d'étudier l'influence de la phase liquide sur le mélange scalaire et de pouvoir évaluer la validité des modèles utilisés en combustion pour représenter le mélange.

Concernant la DNS d'évaporation, notre but était d'utiliser cette méthode dans notre configuration THID, pour cela il nous faut ajouter un aspect qui n'a pas été traité dans l'article de Tanguy et al. : le confinement. En effet, les conditions de périodicités sont équivalentes à une enceinte confinée. L'idée est dans un premier temps d'augmenter la masse volumique du gaz à chaque itération pour prendre en compte la masse de vapeur dégagée par l'évaporation. Cela se traduit par l'apparition d'un terme $\frac{dp}{dt}$ dans le second membre de l'équation de poisson. Cependant, ce terme n'est pas forcément suffisant pour prendre en compte le confinement, notamment lorsque l'on a une multitude de structures gazeuses. La masse apportée par l'évaporation doit être répartie non pas globalement, mais localement à chaque structure gazeuse. Par conséquent, un algorithme de détection de paquet est nécessaire pour identifier les structures gazeuses. Cela nous paraît très coûteux et la détection est difficile à mettre en oeuvre dans un code parallèle. De plus, nous préférons avoir une méthode générale qui permet de résoudre ce problème implicitement. Nous avons commencé à travailler

sur ce sujet mais par manque de temps nous n'avons pas pu proposer une méthode suffisamment mature pour l'intégrer dans cette thèse. Néanmoins, nous avons réussi à résoudre le problème numériquement dans le cas simplifié d'une goutte statique dans un gaz au repos.

Nous pensons qu'un important travail est nécessaire pour prendre en compte de façon satisfaisante le confinement, notons qu'il y a très peu d'articles sur le sujet (combinaison d'un suivi d'interface et d'un code incompressible). Il pourrait être intéressant de passer en formalisme compressible mais cela demanderait un travail conséquent et complexifierait grandement le système d'équation à résoudre et réduirait le pas de temps de façon drastique.

Un autre aspect à améliorer est la conservation de la masse. En effet, la Level Set souffre d'une mauvaise conservation de masse lors de fort cisaillement ou étirement. L'extension de notre méthode d'évaporation vers la méthode CLSVOF est souhaitable pour améliorer la conservation. Cependant, l'extension n'est pas immédiate du fait des hypothèses inhérentes à la méthode VOF : le scalaire transporté est supposé conservatif. Puisque l'évaporation est assimilable à un terme puit dans l'équation de la VOF, celle-ci n'est plus conservative. Certains utilisent un terme puit au sein de l'équation de transport pour prendre en compte les phénomènes de dilatation/évaporation, cela revient à une régression d'interface suivant la normale. Mais cette approche n'est pas correcte car si le terme puit est localement important, il est possible de "retirer" une masse supérieure à celle présente au sein de la cellule. De plus, l'interface peut traverser les cellules voisines une fois l'évaporation effectuée : si on applique seulement un terme puit les cellules voisines ne vont pas prendre en compte l'évaporation. Ce n'est évidemment pas souhaitable et peut avoir un effet important sur la géométrie de la structure liquide : par exemple une goutte sphérique peut devenir carrée.

Une meilleure approche est de propager l'information de la masse évaporée aux cellules voisines pour qu'elle prennent en compte le déplacement de l'interface sur plusieurs cellules. Mais cela nous paraît assez complexe à mettre en oeuvre, nous voulons plutôt prendre en compte l'évaporation en terme de flux au sein de la méthode VOF. En ajoutant un flux correspondant à l'évaporation, cela nous permettrait de conserver un formalisme similaire à la méthode présentée dans le chapitre 5, sans les problèmes susmentionnés. De plus, l'adaptation de la méthode d'évaporation à la méthode CLSVOF homogénéiserait le code puisque la méthode CLSVOF est un aspect important du code d'ARCHER.

Bibliographie

- [1] J.W.S. Lord Rayleigh. On the capillary phenomena of jets. *Proceedings of the Royal Society of London*, 29 :71–97, 1879.
- [2] Pascale Domingo, Luc Vervisch, and Julien Réveillon. Dns analysis of partially premixed combustion in spray and gaseous turbulent flame-bases stabilized in hot air. *Combustion and Flame*, 140(3) :172 – 195, 2005.
- [3] W.P. Jones, A.J. Marquis, and K. Vogiatzaki. Large-eddy simulation of spray combustion in a gas turbine combustor. *Combustion and Flame*, (0) :-, 2013.
- [4] Zakaria Bouali, Cecile Pera, and Julien Reveillon. Numerical analysis of the influence of two-phase flow mass and heat transfer on n-heptane autoignition. *Combustion and Flame*, 159(6) :2056 – 2068, 2012.
- [5] A. Neophytou, E.S. Richardson, and E. Mastorakos. Spark ignition of turbulent recirculating non-premixed gas and spray flames : A model for predicting ignition probability. *Combustion and Flame*, 159(4) :1503 – 1522, 2012.
- [6] Sébastien Tanguy, Thibaut Ménard, and Alain Berlemont. A level set method for vaporizing two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 221(2) :837 – 853, 2007.
- [7] Y. J. Jiang, A. Umemura, and C. K. Law. An experimental investigation on the collision behaviour of hydrocarbon droplets. *Journal of Fluid Mechanics*, 234 :171–190, 0 1992.
- [8] J. QIAN and C. K. LAW. Regimes of coalescence and separation in droplet collision. *Journal of Fluid Mechanics*, null :59–80, 0 1997.
- [9] Mark A. Linne, Megan Paciaroni, Edouard Berrocal, and David Sedarsky. Ballistic imaging of liquid breakup processes in dense sprays. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32(2) :2147 – 2161, 2009.
- [10] David Sedarsky, Saïd Idlahcen, Claude Rozé, and Jean-Bernard Blaisot. Velocity measurements in the near field of a diesel fuel injector by ultrafast imagery. *Experiments in Fluids*, 54(2) :1–12, 2013.

- [11] Y. Wang. Ultrafast x-ray study of dense liquid jet flow dynamics using structure-tracking velocimetry. *Nature Physics*, 4 :305 – 309, 2008.
- [12] Wenyi Cai, Christopher F. Powell, Yong Yue, Suresh Narayanan, Jin Wang, Mark W. Tate, Matthew J. Renzi, Alper Ercan, Ernest Fontes, and Sol M. Gruner. Quantitative analysis of highly transient fuel sprays by time-resolved x-radiography. *Applied Physics Letters*, 83(8) :1671–1673, 2003.
- [13] Kuo-Cheng Lin, Christopher Rajnicek, Jonathan McCall, Campbell Carter, and Kamel Fezzaa. Investigation of pure- and aerated-liquid jets using ultra-fast x-ray phase contrast imaging. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 649(1) :194 – 196, 2011.
- [14] Christophe Dumouchel. On the experimental investigation on primary atomization of liquid streams. *Experiments in Fluids*, 45(3) :371–422, 2008.
- [15] A.N. Kolmogorov. Dissipation of energy in a locally isotropic turbulence. *Doklady Akad. Nauk SSSR*, 32 :141, 1941.
- [16] Stephen B. Pope. *Turbulent flows*. Cambridge Univ. Press, 1 edition, January 2000.
- [17] Marcel Lesieur. *Turbulence in fluids*. Springer, 2008.
- [18] Stanley Osher and James A Sethian. Fronts propagating with curvature-dependent speed : Algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *Journal of Computational Physics*, 79(1) :12 – 49, 1988.
- [19] Stanley Osher and Ronald P. Fedkiw. Level set methods : An overview and some recent results. *Journal of Computational Physics*, 169(2) :463 – 502, 2001.
- [20] Mark Sussman, Peter Smereka, and Stanley Osher. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *Journal of Computational Physics*, 114(1) :146 – 159, 1994.
- [21] Mark Sussman, Emad Fatemi, Peter Smereka, and Stanley Osher. An improved level set method for incompressible two-phase flows. *Computers & Fluids*, 27(5-6) :663 – 680, 1998.
- [22] M. Herrmann. A balanced force refined level set grid method for two-phase flows on unstructured flow solver grids. *Journal of Computational Physics*, 227(4) :2674 – 2706, 2008.
- [23] Sébastien Tanguy and Alain Berlemont. Application of a level set method for simulation of droplet collisions. *International Journal of Multiphase Flow*, 31(9) :1015 – 1035, 2005.

- [24] Elin Olsson and Gunilla Kreiss. A conservative level set method for two phase flow. *Journal of Computational Physics*, 210(1) :225 – 246, 2005.
- [25] Olivier Desjardins, Vincent Moureau, and Heinz Pitsch. An accurate conservative level set/ghost fluid method for simulating turbulent atomization. *Journal of Computational Physics*, 227(18) :8395 – 8416, 2008.
- [26] C. W. Hirt and B. D. Nichols. Volume of fluid (vof) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics*, 39(1) :201 – 225, 1981.
- [27] Denis Gueyffier, Jie Li, Ali Nadim, Ruben Scardovelli, and Stéphane Zaleski. Volume-of-fluid interface tracking with smoothed surface stress methods for three-dimensional flows. *Journal of Computational Physics*, 152(2) :423 – 456, 1999.
- [28] Daniel Fuster, Anne Bagué, Thomas Boeck, Luis Le Moyne, Anthony Leboissetier, Stéphane Popinet, Pascal Ray, Ruben Scardovelli, and Stéphane Zaleski. Simulation of primary atomization with an octree adaptive mesh refinement and vof method. *International Journal of Multiphase Flow*, 35(6) :550 – 565, 2009.
- [29] E. Aulisa, S. Manservigi, R. Scardovelli, and S. Zaleski. Interface reconstruction with least-squares fit and split advection in three-dimensional cartesian geometry. *Journal of Computational Physics*, 225(2) :2301 – 2319, 2007.
- [30] S. Afkhami, S. Zaleski, and M. Bussmann. A mesh-dependent model for applying dynamic contact angles to {VOF} simulations. *Journal of Computational Physics*, 228(15) :5370 – 5389, 2009.
- [31] Mark Sussman and Elbridge Gerry Puckett. A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3d and axisymmetric incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 162(2) :301 – 337, 2000.
- [32] T. Menard, S. Tanguy, and A. Berlemont. Coupling level set/vof/ghost fluid methods : Validation and application to 3d simulation of the primary break-up of a liquid jet. *International Journal of Multiphase Flow*, 33(5) :510 – 524, 2007.
- [33] S. Ozen Unverdi and Grétar Tryggvason. Computations of multi-fluid flows. *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 60(1-4) :70 – 83, 1992.
- [34] Hiroshi Terashima and Grétar Tryggvason. A front-tracking/ghost-fluid method for fluid interfaces in compressible flows. *Journal of Computational Physics*, 228(11) :4012 – 4037, 2009.
- [35] G. Tryggvason, A. Esmaeeli, and N. Al-Rawahi. Direct numerical simulations of flows with phase change. *Computers & Structures*, 83(6-7) :445 – 453, 2005. Frontier of Multi-Phase Flow Analysis and Fluid-Structure.

- [36] G. Tryggvason, B. Bunner, A. Esmaeeli, D. Juric, N. Al-Rawahi, W. Tauber, J. Han, S. Nas, and Y.-J. Jan. A front-tracking method for the computations of multiphase flow. *Journal of Computational Physics*, 169(2) :708 – 759, 2001.
- [37] Douglas Enright, Ronald Fedkiw, Joel Ferziger, and Ian Mitchell. A hybrid particle level set method for improved interface capturing. *Journal of Computational Physics*, 183(1) :83 – 116, 2002.
- [38] Simone E. Hieber and Petros Koumoutsakos. A lagrangian particle level set method. *Journal of Computational Physics*, 210(1) :342 – 367, 2005.
- [39] G. Oger, M. Doring, B. Alessandrini, and P. Ferrant. An improved sph method : Towards higher order convergence. *Journal of Computational Physics*, 225(2) :1472 – 1492, 2007.
- [40] N. Grenier, D. Le Touzé, A. Colagrossi, M. Antuono, and G. Colicchio. Viscous bubbly flows simulation with an interface {SPH} model. *Ocean Engineering*, 69(0) :88 – 102, 2013.
- [41] J. Shinjo and A. Umemura. Simulation of liquid jet primary breakup : Dynamics of ligament and droplet formation. *International Journal of Multiphase Flow*, 36(7) :513 – 532, 2010.
- [42] Ronald P. Fedkiw, Tariq Aslam, Barry Merriman, and Stanley Osher. A non-oscillatory eulerian approach to interfaces in multimaterial flows (the ghost fluid method). *Journal of Computational Physics*, 152(2) :457 – 492, 1999.
- [43] S. Tanguy. *Développement d'une méthode de suivi d'interface, Application aux écoulements diphasiques*. PhD thesis, Université de Rouen, 2004.
- [44] R. D. Reitz. Modeling atomization processes in high-pressure vaporizing sprays. *Atomization and Spray Technology*, 3 :309–337, 1987.
- [45] M. Gorokhovski. The stochastic sub-grid-scale approach for spray atomization. *Journal of Atomization and Spray*, 11 :505–519, 2001.
- [46] M. Gorokhovski and V. Saveliev. Further analyses of kolmogorov's model of breakup. *Physics of Fluids*, 15 :184–192, 2003.
- [47] Mikhael Gorokhovski and Marcus Herrmann. Modeling primary atomization. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 40(1) :343–366, 2008.
- [48] Ariane Vallet and Roland Borghi. Modélisation eulerienne de l'atomisation d'un jet liquide. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences - Series IIB - Mechanics-Physics-Astronomy*, 327(10) :1015 – 1020, 1999.

- [49] Jérémy Chesnel. *Simulation aux grandes échelles de l'atomisation, Application à l'injection automobile*. PhD thesis, Université de Rouen, 2010.
- [50] J. Chesnel, Thibaut Menard, Julien Reveillon, and Francois-Xavier Demoulin. Subgrid analysis of liquid jet atomization. *Atomization and Sprays*, 21(1) :41–67, 2011.
- [51] J. Chesnel, Julien Reveillon, Thibaut Menard, and Francois-Xavier Demoulin. Large eddy simulation of liquid jet atomization. *Atomization and Sprays*, 21(9) :711–736, 2011.
- [52] R. Lebas, T. Menard, P.A. Beau, A. Berlemont, and F.X. Demoulin. Numerical simulation of primary break-up and atomization : Dns and modelling study. *International Journal of Multiphase Flow*, 35(3) :247 – 260, 2009.
- [53] A. Umemura. Interactive droplet vaporization and combustion : approach from asymptotics. *Progress in energy and combustion science*, 20 (4) :325 – 372, 1994.
- [54] C. T. Crowe, editor. *Multiphase flow handbook*. Taylor & Francis, 2006.
- [55] W. A. Sirignano. *Fluid dynamics and transport of droplets and sprays*. Cambridge University Press, 1999.
- [56] Julien Reveillon and François-Xavier Demoulin. Effects of the preferential segregation of droplets on evaporation and turbulent mixing. *Journal of Fluid Mechanics*, 583(-1) :273–302, 2007.
- [57] Julien Reveillon and Luc Vervisch. Analysis of weakly turbulent dilute-spray flames and spray combustion regimes. *Journal of Fluid Mechanics*, 537 :317–347, 2005.
- [58] J. Reveillon and L. Vervisch. Spray vaporization in nonpremixed turbulent combustion modeling : a single droplet model. *Combustion and Flame*, 121(1-2) :75 – 90, 2000.
- [59] George Strotos, Manolis Gavaises, Andreas Theodorakakos, and George Bergeles. Numerical investigation on the evaporation of droplets depositing on heated surfaces at low weber numbers. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 51(7-8) :1516 – 1529, 2008.
- [60] George Strotos, Manolis Gavaises, Andreas Theodorakakos, and George Bergeles. Numerical investigation of the evaporation of two-component droplets. *Fuel*, 90(4) :1492 – 1507, 2011.
- [61] Samuel W. J. Welch. Local simulation of two-phase flows including interface tracking with mass transfer. *Journal of Computational Physics*, 121(1) :142 – 154, 1995.

- [62] Xavier Calimez. *Simulation à petite échelle par une méthode V.O.F. d'écoulements diphasiques réactifs*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, EM2C, 1998.
- [63] Damir Juric and Grétar Tryggvason. Computations of boiling flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 24(3) :387 – 410, 1998.
- [64] Samuel W. J. Welch and John Wilson. A volume of fluid based method for fluid flows with phase change. *J. Comput. Phys.*, 160(2) :662–682, May 2000.
- [65] G. Tomar, G. Biswas, A. Sharma, and A. Agrawal. Numerical simulation of bubble growth in film boiling using a coupled level-set and volume-of-fluid method. *Physics of Fluids*, 17(11) :112103, 2005.
- [66] Frédéric Gibou, Ligu Chen, Duc Nguyen, and Sanjoy Banerjee. A level set based sharp interface method for the multiphase incompressible navier-stokes equations with phase change. *Journal of Computational Physics*, 222(2) :536 – 555, 2007.
- [67] Jan Schlottke and Bernhard Weigand. Direct numerical simulation of evaporating droplets. *Journal of Computational Physics*, 227(10) :5215 – 5237, 2008.
- [68] Y. Jin and B.D. Shaw. Computational modeling of n-heptane droplet combustion in air-diluent environments under reduced-gravity. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 53(25–26) :5782 – 5791, 2010.
- [69] G. Luret, G. Blokkeel, R. Lebas, T. Ménard, A. Berlemont, and F.X. Demoulin. Spray interactions : modeling of collision/coalescence phenomena. In *22nd European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems*. Como Lake, Italy., 2008.
- [70] G. Luret, T. Menard, G. Blokkeel, A. Berlemont, J. Réveillon, and F.X. Demoulin. Modeling collision outcome in moderately dense spray. *Journal of Atomization and Spray*, 20(3) :93, 2010.
- [71] G. Luret, T. Ménard, A. Berlemont, and F.X. Demoulin. Dns study of collision and coalescence over a wide range of volume fraction. In *Proceedings of ASME 2010 3rd Joint US-European Fluids Engineering Summer Meeting - FEDSM2010-ICNMM2010*. Montreal, CANADA., 2010.
- [72] Gilou Agbaglah, Sébastien Delaux, Daniel Fuster, Jérôme Hoepffner, Christophe Josserand, Stéphane Popinet, Pascal Ray, Ruben Scardovelli, and Stéphane Zaleski. Parallel simulation of multiphase flows using octree adaptivity and the volume-of-fluid method. *Comptes Rendus Mécanique*, 339(2-3) :194 – 207, 2011. High Performance Computing.
- [73] G. Luret. *Etude numérique des phénomènes de collision/coalescence en milieu dense*. PhD thesis, Université de Rouen, 2010.

- [74] Thibaut Ménard. *Développement d'une méthode Level Set pour le suivi d'interface, application de la rupture de jet liquide*. PhD thesis, Université de Rouen, 2007.
- [75] Chi-Wang Shu. Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws. Technical Report NASA CR-97-206253 ICASE Report No. 97-65, Institute for Computer Applications in Science and Engineering, November 1997.
- [76] Xu-Dong Liu, Ronald P. Fedkiw, and Myungjoo Kang. A boundary condition capturing method for poisson's equation on irregular domains. *Journal of Computational Physics*, 160(1) :151 – 178, 2000.
- [77] Carlos Rosales and Charles Meneveau. Linear forcing in numerical simulations of isotropic turbulence : Physical space implementations and convergence properties. *Physics of Fluids*, 17(9) :095106, 2005.
- [78] L Danaila, R A Antonia, and P Burattini. Progress in studying small-scale turbulence using 'exact' two-point equations. *New Journal of Physics*, 6(1) :128, 2004.
- [79] T. Ishihara, T. Gotoh, and Y. Kaneda. Study of high-reynolds number isotropic turbulence by direct numerical simulation. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 41(1) :165–180, 2009.
- [80] Toshiyuki Gotoh, Daigen Fukayama, and Tohru Nakano. Velocity field statistics in homogeneous steady turbulence obtained using a high-resolution direct numerical simulation. *Physics of Fluids*, 14(3) :1065–1081, 2002.
- [81] C. Guichard, J. Reveillon, and R. Haugel. DNS of statistically stationary one-and two-phase turbulent combustion : a turbulent injection procedure,. *Turb. Flow & Comb.*, 73 :133–167, 2004.
- [82] S. De Chaisemartin, L. Fréret, D. Kah, F. Laurent, R.O. Fox, J. Reveillon, and M. Massot. Eulerian models for turbulent spray combustion with polydispersity and droplet crossing. *Comptes Rendus Mécanique*, 337(6-7) :438 – 448, 2009.
- [83] B. Duret, J. Reveillon, T. Menard, and F.X. Demoulin. Improving primary atomization modeling through dns of two-phase flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 55(0) :130 – 137, 2013.
- [84] J. U. Brackbill, D. B. Kothe, and C. Zemach. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics*, 100(2) :335 – 354, 1992.
- [85] E. Labourasse, D. Lacanette, A. Toutant, P. Lubin, S. Vincent, O. Lebaigue, J.-P. Caltagirone, and P. Sagaut. Towards large eddy simulation of isothermal two-phase flows : Governing equations and a priori tests. *International Journal of Multiphase Flow*, 33(1) :1 – 39, 2007.

- [86] P. Trontin, S. Vincent, J.L. Estivalezes, and J.P. Caltagirone. Direct numerical simulation of a freely decaying turbulent interfacial flow. *International Journal of Multiphase Flow*, 36(11-12) :891 – 907, 2010.
- [87] B. Duret, G. Luret, J. Reveillon, T. Menard, A. Berlemont, and F.-X. Demoulin. Dns analysis of turbulent mixing in two-phase flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 40(0) :93 – 105, 2012.
- [88] C Corre, J. Estivalezes, Stephane Vincent, and SIMONIN Olivier. Direct numerical simulation of the motion of particles larger than the kolomogorov scale in a homogeneous isotropic turbulence. In *2008 ASME Fluids Engineering Conference, 10-14 Aout 2008, Jacksonville, Florida USA.*, 2008.
- [89] Jiakai Lu and Gretar Tryggvason. Effect of bubble size in turbulent bubbly downflow in a vertical channel. *Chemical Engineering Science*, 62(11) :3008 – 3018, 2007.
- [90] J. A. Sethian. A fast marching level set method for monotonically advancing fronts. *Proceedings of the National Academy of Sciences USA* 93, 4 :1591, 1996.
- [91] M. Kang, R. P. Fedkiw, and X.D. Liu. Boundary conditions capturing method for multiphase incompressible flow. *Journal of Scientific Computing*, 3 :323–360, 2000.
- [92] V. Eswaran and S. B. Pope. Direct numerical simulations of the turbulent mixing of a passive scalar. *Physics of Fluids*, 31(3) :506–520, 1988.
- [93] Christophe Morel. On the surface equations in two-phase flows and reacting single-phase flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 33(10) :1045 – 1073, 2007.
- [94] 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(3) :519 – 531, 2002.
- [95] Stéphane Jay, François Lacas, and Sébastien Candel. Combined surface density concepts for dense spray combustion. *Combustion and Flame*, 144(3) :558 – 577, 2006.
- [96] Novid Beheshti, AlexeyA. Burluka, and Michael Fairweather. Assessment of σ -y liq model predictions for air-assisted atomisation. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, 21 :381–397, 2007.
- [97] G. Tryggvason, S. Thomas, J. Lu, and B. Aboulhasanzadeh. Multiscale issues in dns of multiphase flows. *Acta Mathematica Scientia*, 30(2) :551 – 562, 2010.
- [98] V. Eswaran and S.B. Pope. Examination of forcing in direct numerical simulations of turbulence. *Computers and Fluids*, 16(3) :257 – 278, 1988.

- [99] F. X. Demoulin and R. Borghi. Modeling of turbulent spray combustion with application to diesel like experiment. *Combustion and Flame*, 129(3) :281 – 293, 2002.
- [100] R. Borghi. Turbulent combustion modeling. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 14 :245–292, 1988.
- [101] P.A. Libby and F.A. Williams. *Turbulent reacting flows*. Academic Press, London, 1994.
- [102] L. Danaïla and R. A. Antonia. Spectrum of a passive scalar in moderate reynolds number homogeneous isotropic turbulence. *Physics of Fluids*, 21(11) :111702, 2009.
- [103] T. Poinso and D. Veynante. Theoretical and numerical combustion. page 522, 2005.
- [104] Duc Q. Nguyen, Ronald P. Fedkiw, and Myungjoo Kang. A boundary condition capturing method for incompressible flame discontinuities. *Journal of Computational Physics*, 172(1) :71 – 98, 2001.
- [105] Tariq D. Aslam. A partial differential equation approach to multidimensional extrapolation. *Journal of Computational Physics*, 193(1) :349 – 355, 2004.
- [106] Frederic Gibou, Ronald P. Fedkiw, Li-Tien Cheng, and Myungjoo Kang. A second-order-accurate symmetric discretization of the poisson equation on irregular domains. *Journal of Computational Physics*, 176(1) :205 – 227, 2002.
- [107] P.H. Chiu, R.K. Lin, and Tony W.H. Sheu. A differentially interpolated direct forcing immersed boundary method for predicting incompressible navier–stokes equations in time-varying complex geometries. *Journal of Computational Physics*, 229(12) :4476 – 4500, 2010.
- [108] Emeline Noel. *Simulation numérique directe d’écoulements à l’aide d’une méthode de frontière immergée*. PhD thesis, Université de Rouen, 2012.
- [109] R. Borghi and M. Destriau. *La combustion et les flammes*. 1995.