Couplage entre modèles diphasiques à "phases séparées" et à "phase dispersée" pour la simulation de l'atomisation primaire en combustion cryotechnique

Clément Le Touze

▶ **To cite this version:**

Clément Le Touze. Couplage entre modèles diphasiques à "phases séparées" et à "phase dispersée" pour la simulation de l'atomisation primaire en combustion cryotechnique. Analyse numérique [math.NA]. Universite Nice Sophia Antipolis, 2015. Français. NNT : . tel-01250527v1

HAL Id: tel-01250527

https://theses.hal.science/tel-01250527v1

Submitted on 5 Jan 2016 (v1), last revised 8 Mar 2016 (v2)

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.

Distributed under a Creative Commons Attribution - NonCommercial - NoDerivatives 4.0 International License

UNIVERSITÉ NICE SOPHIA ANTIPOLIS - UFR Sciences
École Doctorale en Sciences Fondamentales et Appliquées (EDSFA)

THÈSE

pour obtenir le titre de
Docteur en Sciences
de l'UNIVERSITÉ Nice Sophia Antipolis
Spécialité : **Mathématiques Appliquées**

présentée et soutenue par
Clément LE TOUZE

COUPLAGE ENTRE MODÈLES DIPHASIQUES À « PHASES SÉPARÉES » ET À « PHASE DISPERSÉE » POUR LA SIMULATION DE L'ATOMISATION PRIMAIRE EN COMBUSTION CRYOTECHNIQUE

Thèse dirigée par **Hervé GUILLARD**
soutenue le 3 décembre 2015

Jury :

M.	François-Xavier DEMOULIN	Maître de conférences, Université de Rouen	Rapporteur
M.	Jean-Claude LATCHÉ	Directeur de Recherche, IRSN Cadarache	Rapporteur
M.	Marc MASSOT	Professeur, Ecole Centrale Paris	Examinateur
M.	Boniface NKONGA	Professeur, Université Nice Sophia Antipolis	Examinateur
Mme	Marie THERON	Ingénieur, CNES DLA Paris Daumesnil	Examinateur
M.	Angelo MURRONE	Ingénieur de Recherche, ONERA Châtillon	Encadrant
M.	Hervé GUILLARD	Directeur de Recherche, INRIA Sophia Antipolis	Directeur de thèse

ONERA
THE FRENCH AEROSPACE LAB

Université Nice Sophia Antipolis

Résumé

Les écoulements diphasiques issus de l'atomisation des jets liquides jouent un rôle prépondérant dans bon nombre de systèmes propulsifs, que ce soit dans le domaine automobile, aéronautique ou spatial. Dans ce dernier cas, c'est notamment vrai pour les moteurs-fusées à ergols liquides cryogéniques fonctionnant en régime subcritique, équipant par exemple les lanceurs de la famille Ariane. L'étude expérimentale de tels engins propulsifs étant complexe et onéreuse, disposer d'outils numériques à même de simuler fidèlement leur fonctionnement, et donc de prendre en compte l'ensemble des phénomènes physiques et leurs interactions, se révèle être un objectif aussi important qu'ambitieux. En effet, les conditions sévères qui règnent dans les moteurs cryotechniques, où de forts gradients de température, vitesse et densité sont rencontrés, mettent à l'épreuve la robustesse des méthodes numériques. Une autre difficulté majeure réside également dans le caractère fortement multi-échelles du problème, en raison duquel aucune approche numérique existante n'est capable à elle seule de décrire parfaitement l'ensemble des échelles liquides. Partant de cette constatation, les travaux présentés dans cette thèse visent à mettre en place une stratégie de couplage entre des modèles bien adaptés aux différentes topologies d'écoulement diphasique. La démarche adoptée consiste précisément à coupler un modèle adapté aux zones d'écoulement diphasique à phases séparées, en l'occurrence basé sur une approche à interface diffuse de type fluide homogène (ou "4 équations"), et un modèle cinétique eulérien pour la phase dispersée, reposant sur une approche sectionnelle de la distribution en taille de gouttes. En outre, ces travaux s'inscrivent également dans le cadre du développement de la plateforme logicielle multi-physique CEDRE, développée par l'ONERA et dédiée au domaine de l'énergétique. La première partie du manuscrit établit le contexte et les problématiques de la propulsion cryotechnique et propose une revue bibliographique, à la fois théorique et numérique, sur les écoulements diphasiques issus de l'atomisation des jets liquides. La deuxième partie permet de présenter les détails de la stratégie mise en œuvre, en précisant les équations sous-jacentes, les modèles physiques et les méthodes numériques retenus. Elle permet également de mettre en lumière des besoins en méthodes numériques et en modèles physiques nouveaux. Développés dans le cadre de ces travaux de thèse, ces modèles et méthodes font spécifiquement l'objet de la troisième partie du manuscrit. Ainsi, une nouvelle méthode d'interpolation MUSCL multipente pour maillages non structurés généraux est présentée. Elle permet d'améliorer la robustesse et la précision des schémas de discrétisation spatiale d'ordre 2 de CEDRE, notamment en présence d'écoulements diphasiques. Le modèle de couplage développé afin de décrire l'atomisation primaire est ensuite introduit et analysé. Une première mise en œuvre et validation élémentaire de ce modèle est apportée, avant que l'ensemble de la stratégie ne soit appliquée à la simulation 3D LES du banc d'essai Mascotte, développé par l'ONERA pour l'étude de la combustion cryotechnique. Les premiers résultats obtenus permettent de démontrer le bon comportement global de la stratégie mise en place et particulièrement des méthodes numériques et des modèles physiques développés.

Mots-clés : écoulements diphasiques, phases séparées, phase dispersée, atomisation primaire, combustion cryotechnique, modèle à 4 équations, modèle à fluide localement homogène, modèle cinétique eulérien, méthode sectionnelle, méthode MUSCL multipente, banc MASCOTTE, code CEDRE.

Abstract

Whether it be in the automotive, aeronautical or aerospace industries, two-phase flows resulting from the atomization of liquid jets play a significant role for the proper functioning of many propulsion systems. This is especially true within cryogenic liquid-propellant rocket engines under subcritical operating conditions, such as those that equip the launchers of the Ariane family. Since the experimental investigation of such propulsion devices is complex and expensive, developing numerical tools able to accurately simulate their functioning, including all the physical phenomena and their interactions, is a crucial but nonetheless ambitious objective. Indeed, the harsh conditions within cryogenic rocket engines, where large temperature, velocity and density gradients are encountered, severely challenge the robustness of numerical methods. Another major difficulty is due to the multiscale nature of the problem, as a result of which there is currently no numerical approach able to perfectly describe all the liquid scales on its own. Based on this observation, the work presented in this thesis aims at setting up a coupling strategy between different models, each one being adapted to a specific two-phase flow topology. The approach adopted precisely consists in coupling a model suitable for the "separated phases" areas of the two-phase flow, namely based on a diffuse interface approach and a locally homogeneous flow assumption, and a eulerian kinetic model for the dispersed phase, based on a sectional method to describe the droplet size distribution. Besides, this work also comes within the scope of the development of the CEDRE software, which is a multiphysics simulation platform developed at ONERA and dedicated to the field of energetics. The first part of the document establishes the context of cryogenic propulsion and reviews the literature on both the theoretical and numerical models dedicated to two-phase flow resulting from the atomization of liquid jets. The second part introduces the details of the implemented strategy, namely the governing equations and the selected physical models and numerical methods. This second part also allows us to highlight the needs in new numerical methods and physical models, which are then especially introduced in the third part of the document. A new multislope MUSCL method for general unstructured meshes is thus developed. It improves the robustness and accuracy of the second-order spatial discretization schemes within the CEDRE code, especially when dealing with two-phase flows. The coupling model intended to account for primary atomization is then exposed and analyzed, and a first implementation and elementary validation of the model is provided. Eventually the whole strategy is applied to the 3D Large Eddy Simulation of the ONERA's Mascotte test bench for cryogenic combustion research. The first results obtained show the good behaviour of the strategy and especially of the numerical methods and physical models developed.

Keywords : two-phase flows, separated phases, dispersed phase, primary atomization, cryogenic combustion, 4-equation model, locally homogeneous flow model, eulerian kinetic model, sectional method, multislope MUSCL method, MASCOTTE test bench, CEDRE code.

Remerciements

...

Table des matières

Introduction **1**

I Modélisation des écoulements diphasiques pour la propulsion cryotechnique **7**

1 Contexte de la propulsion spatiale et fonctionnement des moteurs cryotechniques **9**
1.1 Historique de la propulsion spatiale . . . 11
1.1.1 Genèse des programmes spatiaux soviétiques et américains . . . 11
1.1.2 Développement du programme spatial français puis européen . . . 11
1.2 Paramètres caractéristiques de la propulsion . . . 14
1.3 Fonctionnement des moteurs-fusées cryotechniques . . . 16
1.3.1 Recherche expérimentale en combustion cryotechnique : le banc MASCOTTE . . . 17
1.3.2 Description des mécanismes physiques en sortie des injecteurs coaxiaux cryotechniques fonctionnant en régime subcritique . . . 20
1.3.3 La simulation numérique pour l'étude de la combustion cryotechnique . . . 21

2 Études théoriques et expérimentales de l'atomisation des jets liquides **23**
2.1 Nombres adimensionnels caractéristiques . . . 25
2.2 Atomisation primaire mécanique (jets libres) . . . 26
2.2.1 Classification des régimes de rupture . . . 26
2.2.2 Description des mécanismes physiques . . . 27
2.3 Atomisation primaire aérodynamique (jets assistés) . . . 29
2.3.1 Classification des régimes de rupture . . . 29
2.3.2 Description des mécanismes physiques . . . 31
2.3.3 Corrélations utiles . . . 33
2.3.4 Caractérisation de la configuration Mascotte . . . 35

3 Revue bibliographique sur la modélisation numérique des écoulements diphasiques atomisants **37**
3.1 Classification des approches numériques . . . 39
3.2 Modèles intégrant la reconstruction de l'interface . . . 41
3.2.1 Méthodes eulériennes à capture d'interface . . . 41
3.2.2 Traitement des discontinuités et des relations de saut . . . 42
3.2.3 Lien avec la modélisation de la turbulence . . . 42
3.3 Modèles à interface diffuse . . . 43
3.3.1 Etablissement du modèle général homogénéisé . . . 44
3.3.2 Relaxation du modèle général vers des modèles simplifiés . . . 49
3.3.3 Equation de transport pour la densité d'aire interfaciale . . . 50
3.4 Modèles cinétiques pour la phase dispersée . . . 54
3.4.1 L'équation cinétique de Williams-Boltzmann . . . 55
3.4.2 Les différentes approches pour la résolution de l'équation cinétique . . . 56
3.4.3 Présentation détaillée des méthodes eulériennes . . . 58
3.5 Couplage entre modèles à "phases séparées" et à "phase dispersée" . . . 69

II Couplage de modèles diphasiques pour la simulation numérique du banc Mascotte

avec le code CEDRE **71**

4 Justification de la stratégie retenue avec le code CEDRE **73**
4.1 Présentation du code CEDRE . . . 75
4.2 CEDRE et les écoulements diphasiques . . . 75
4.3 Présentation et justification de la stratégie retenue . . . 77

5 Modélisation du fluide avec le solveur CHARME **79**
5.1 Équations de Navier-Stokes compressibles multi-espèces . . . 81
5.1.1 Équations de conservation des espèces . . . 81
5.1.2 Équation de conservation de la quantité de mouvement . . . 82
5.1.3 Équation de conservation de l'énergie . . . 84
5.1.4 Formulation vectorielle . . . 84
5.2 Modélisation des flux de diffusion . . . 85
5.2.1 Nombres adimensionnels . . . 85
5.2.2 Diffusion des espèces . . . 85
5.2.3 Diffusion de la quantité de mouvement . . . 86
5.2.4 Diffusion de la chaleur . . . 87
5.3 Coefficients de transport . . . 87
5.3.1 Diffusivité . . . 87
5.3.2 Viscosité . . . 87
5.3.3 Conductivité thermique . . . 87
5.3.4 Grandeurs moyennes pour le fluide . . . 88
5.4 Modélisation de la turbulence . . . 88
5.4.1 Aspects théoriques : la cascade énergétique . . . 88
5.4.2 Stratégies pour la simulation numérique de la turbulence . . . 89
5.4.3 Filtrage des équations de conservation . . . 90
5.4.4 Fermeture des termes turbulents . . . 93
5.4.5 L'approche implicite de la turbulence . . . 95
5.5 Fermeture thermodynamique du système fluide . . . 96
5.5.1 Rappels de thermodynamique . . . 96
5.5.2 Changement de variables . . . 99
5.5.3 Modélisation thermodynamique de la phase gazeuse . . . 100
5.5.4 Modélisation thermodynamique de la phase liquide . . . 101
5.5.5 Lois de mélange . . . 104
5.5.6 Problèmes de robustesse liés à la fermeture thermodynamique du système fluide . . . 106

6 Modélisation eulérienne de la phase dispersée avec le solveur SPIREE **109**
6.1 Choix d'un modèle eulérien pour la phase dispersée . . . 111
6.2 Formulation vectorielle . . . 112
6.2.1 Variables naturelles et quantités conservées . . . 112
6.2.2 Flux et termes sources . . . 113
6.2.3 Système des équations de conservation . . . 113
6.3 Système d'équations global regroupant le fluide et la phase dispersée . . . 114

7 Modélisation des termes sources **117**
7.1 Termes sources d'interaction entre la phase dispersée et le fluide . . . 119
7.1.1 Modélisation du transfert de quantité de mouvement . . . 119
7.1.2 Modélisation du transfert de masse et de chaleur par évaporation . . . 120
7.2 Termes sources internes à la phase dispersée . . . 122
7.2.1 Transfert entre sections par fragmentation . . . 122
7.2.2 Flux entre sections liés à l'évaporation . . . 126
7.3 Termes sources internes au fluide . . . 127
7.3.1 Caractérisation du régime de combustion turbulente sur la configuration Mascotte . . . 128
7.3.2 Modèles de Spalding et Magnussen . . . 129
7.3.3 Modèle de relaxation vers l'équilibre . . . 129

8 Méthodes numériques de résolution **131**
8.1 Discrétisation des systèmes d'équations selon la méthode des volumes finis en approche "cell-center" 133
8.2 Schémas de flux numériques . . . 135

8.2.1 Approximation des flux convectifs dans CHARME . . . 135
8.2.2 Approximation des flux de diffusion dans CHARME . . . 140
8.2.3 Approximation des flux convectifs dans SPIREE . . . 141
8.3 Méthode MUSCL pour la discrétisation spatiale d'ordre 2 . . . 142
8.3.1 Procédures d'interpolations dans CEDRE . . . 143
8.3.2 Algorithmes de limitation des gradients de maille . . . 143
8.3.3 Choix des variables interpolées . . . 145
8.4 Intégration temporelle . . . 145
8.4.1 Splitting d'opérateurs . . . 146
8.4.2 Schémas d'avancement en temps . . . 147

III Développement de méthodes numériques et de modèles physiques 153

9 Développement d'une méthode MUSCL multipente adaptée aux maillages non structurés généraux 155
9.1 Contexte général des méthodes MUSCL . . . 157
9.2 Présentation de la nouvelle méthode multipente . . . 158
9.2.1 Discrétisation en volumes finis des lois de conservation hyperboliques scalaires . . . 158
9.2.2 Nouvelle méthode multipente . . . 160
9.3 Construction des pentes . . . 160
9.3.1 Algorithme en 2D . . . 160
9.3.2 Algorithme en 3D . . . 161
9.4 Propriétés mathématiques de la reconstruction . . . 163
9.4.1 Précision d'ordre 2 . . . 163
9.4.2 Stabilité L^∞ . . . 165
9.5 Construction de limiteurs performants . . . 170
9.5.1 Limiteurs pivots dépendants du nombre CFL . . . 171
9.5.2 Génération d'un limiteur hybride . . . 171
9.6 Cas-tests numériques . . . 173
9.6.1 Traitement des conditions aux limites . . . 173
9.6.2 Cas-test de rotation 2D . . . 173
9.6.3 Cas-test 3D . . . 180
9.6.4 Cas-test de la marche dans un écoulement à Mach 3 . . . 182
9.6.5 Cas-test de jet liquide . . . 184
9.7 Conclusions et perspectives de développement . . . 186

10 Modélisation du couplage CHARME-SPIREE pour l'atomisation primaire 191
10.1 Présentation du modèle . . . 193
10.2 Modélisation du transfert par atomisation primaire . . . 194
10.2.1 Fréquence caractéristique de l'atomisation . . . 194
10.2.2 Fonction d'efficacité . . . 195
10.2.3 Propriétés des gouttes atomisées . . . 196
10.2.4 Déduction des termes sources correspondants dans SPIREE . . . 198
10.2.5 Lien entre le volume des cellules du maillage et le diamètre des gouttes atomisées . . . 199
10.2.6 Remarque sur la conservation de la quantité de mouvement . . . 200
10.3 Modélisation du transfert par pseudo-coalescence . . . 201
10.3.1 Fréquence caractéristique . . . 202
10.3.2 Forme de la fonction d'efficacité . . . 203
10.3.3 Déduction des autres termes sources liés à la pseudo-coalescence . . . 204
10.4 Analyse de la variation de pression générée par le transfert CHARME-SPIREE . . . 204
10.5 Validation élémentaire du modèle sur une configuration simplifiée . . . 213

11 Application à la combustion cryotechnique sur la configuration du banc Mascotte 227
11.1 Géométrie, maillage et mise en données du calcul CEDRE . . . 229
11.2 Évolution temporelle des valeurs moyennes, minimales et maximales . . . 231
11.3 Évolution temporelle de la longueur de dard liquide . . . 233
11.4 Champs moyens pour le fluide . . . 234
11.5 Champs instantanés pour la phase dispersée . . . 239
11.6 Résultats relatifs aux distributions en taille et vitesse des gouttes . . . 243
11.7 Mise en évidence et analyse élémentaire des oscillations de pression . . . 249

11.8 Visualisations qualitatives . . . 253

Conclusion **257**

IV Annexes **261**

A Établissement du modèle semi-cinétique avec propriétés thermodynamiques fonctions de la température **263**
A.1 Définition de grandeurs moyennes . . . 264
A.2 Équation sur le nombre de gouttes . . . 265
A.3 Équation sur la masse . . . 265
A.4 Équation sur la quantité de mouvement . . . 266
A.5 Équation sur l'énergie interne . . . 267
A.6 Bilan du système semi-cinétique obtenu . . . 268

B Établissement de modèles eulériens intégrés sur l'espace des tailles **271**
B.1 Intégration en taille générique du système semi-cinétique . . . 273
B.1.1 Équation sur le nombre de gouttes . . . 273
B.1.2 Équation sur la masse . . . 274
B.1.3 Équation sur la quantité de mouvement . . . 275
B.1.4 Équation sur l'énergie interne . . . 276
B.1.5 Système d'équations générique . . . 277
B.2 Modèle bi-fluide . . . 277
B.3 Méthode multi-classes . . . 278
B.4 Méthodes sectionnelles . . . 279
B.4.1 Hypothèse sur la forme des fonctions de distribution . . . 279
B.4.2 Système d'équations des méthodes sectionnelles . . . 280
B.4.3 Détermination des coefficients de la fonction de distribution . . . 282
B.4.4 Démarche-type d'un calcul sectionnel . . . 283
B.4.5 Intégration numérique des termes sources . . . 284
B.5 Incidence du choix de la variable taille . . . 284
B.6 Dérivation d'une équation sur l'énergie totale . . . 285
B.6.1 Écriture de l'équation de quantité de mouvement sous forme non-conservative . . . 285
B.6.2 Établissement de l'équation sur l'énergie cinétique . . . 286
B.6.3 Établissement de l'équation sur l'énergie totale . . . 287

C Définitions et propriétés sur les tenseurs **289**

D Étude de la fermeture thermodynamique du système fluide **291**
D.1 Revue bibliographique élémentaire . . . 291
D.1.1 Analyse et origine du phénomène . . . 291
D.1.2 Solutions interdisant la diffusion de l'interface . . . 292
D.1.3 Solutions utilisant des méthodes à interfaces diffuses . . . 292
D.2 Analyse d'un cas de référence . . . 293
D.2.1 Écriture de l'algorithme de Newton . . . 295
D.2.2 Cas où l'espèce B est de type gaz parfait . . . 298
D.2.3 Cas où l'espèce B est de type liquide compressible . . . 301
D.3 Conséquences sur la description thermodynamique de l'oxygène liquide . . . 313

E Étude de la robustesse des modèles d'évaporation de gouttes **317**
E.1 Introduction . . . 317
E.2 Établissement du modèle général d'évaporation . . . 317
E.2.1 Équations locales . . . 317
E.2.2 Définition et résolution d'une équation type . . . 318
E.2.3 Intégration de l'équation liée au transfert de masse (E.7) . . . 320
E.2.4 Intégration de l'équation liée au transfert de chaleur (E.8) . . . 321
E.2.5 Prise en compte des effets convectifs sur les échanges de chaleur et de masse . . . 323
E.2.6 Prise en compte de l'effet du film de vapeur entourant la goutte . . . 323
E.2.7 Synthèse . . . 324

E.3 Algorithmes de résolution numérique . . . 324
E.3.1 Modèle de chauffage et évaporation découplés . . . 324
E.3.2 Résolution du modèle général . . . 326
E.3.3 Problématiques de robustesse avec l'algorithme de résolution du modèle général . . . 327
E.3.4 Mise en place d'un modèle hybride . . . 331
E.3.5 Problématique de la fin d'évaporation . . . 335
E.4 Cas de validation . . . 336
E.5 Conclusion . . . 337

Bibliographie **352**

Liste des tableaux

1.1 Caractéristiques techniques des moteurs cryotechniques HM-7B, Vulcain 2 et Vinci. 17
1.2 Données caractéristiques des ergols injectés en régime nominal pour Mascotte A-10. Unités S.I. sauf mention contraire. Données thermodynamiques : source NIST. 19

3.1 Classification des approches numériques pour décrire les écoulements diphasiques atomisants. . . 40
3.2 Expression des termes d'échanges interfaciaux dans le système (3.10). 47
3.3 Hiérarchie de modèles diphasiques obtenus par relaxation du modèle général. 50
3.4 Avantages et inconvénients des méthodes lagrangiennes et eulériennes. 57

5.1 Définitions des potentiels thermodynamiques et relations différentielles. 96
5.2 Exemple de paramètres physiques de l'oxygène liquide (unités S.I.). 103
5.3 Vitesse du son dans un gaz pur, un liquide pur, et un milieu diphasique. Exemple d'application numérique (unités SI). 106

9.1 Liste des maillages utilisés. 174
9.2 Nombre d'éléments $\mathcal{N}$ pour les maillages G_1 à G_6. 174
9.3 Ordre moyen des schémas en norme L^1 pour les six maillages. Cas discontinu. 177
9.4 Ordre moyen des schémas en norme L^1 pour les six maillages. Cas régulier. 181
9.5 Ordre moyen des schémas en norme L^∞ pour les six maillages. Cas régulier. 181
9.6 Erreurs en normes L^1 et L^∞ pour le cas 3D. 181

10.1 Variation de pression relative pour quelques valeurs particulières de (ξ, α_l^n). Mélange air-eau et hydrogène-oxygène. 212
10.2 Mise en données de la simulation ***S1***. 214
10.3 Mise en données de la simulation ***S2***. 214
10.4 Mise en données de la simulation ***S3***. 215

11.1 Mise en données CEDRE pour la simulation 3D. 230
11.2 Comparaison simulation-expérience des diamètres moyens et vitesses moyennes en 6 capteurs. . . 244

D.1 Jeu de données pour l'espèce B "LOx". 308
D.2 Jeu de données pour l'espèce A "H_2". 308
D.3 Jeu de données pour l'espèce A "H_2O". 308
D.4 Convergence de l'algorithme de Newton, cas ***LOx-H_2*** 309
D.5 Convergence de l'algorithme de Newton, cas ***LOx-H_2O*** 309

Table des figures

1 Organisation du manuscrit et démarche suivie. 5

1.1 Les différentes versions du lanceur Ariane. Crédits : CNES / ESA / D.Ducros. 12
1.2 Décollage d'un lanceur Ariane 5 ECA le 1er juillet 2009. Crédits : CNES / ESA / Arianespace. . 13
1.3 Les différents étages du lanceur Ariane 5 ECA. Crédits : Arianespace. 13
1.4 Version Ariane 6 PPH "multi P linéaire". Crédits : ESA / D.Ducros. 14
1.5 Evolution schématique de la pression, la température et la vitesse le long d'une tuyère de Laval (source Wikipédia). 15
1.6 Moteurs cryotechniques HM-7B et Vulcain 2. Copyright : Eric Forterre / Snecma / Safran. 17
1.7 Visualisation du banc Mascotte en fonctionnement (point A-10). 18
1.8 Géométrie du banc Mascotte pour le point de fonctionnement A-10 (issu de Vingert [289]). . . . 19
1.9 Géométrie de l'injecteur coaxial pour le point de fonctionnement Mascotte A-10. 19
1.10 Phénomènes en sortie d'un injecteur coaxial cryotechnique en régime subcritique. 20

2.1 Régimes d'atomisation primaire mécanique selon Reitz [226] (gauche) et Faeth [90] (droite). . . 27
2.2 Les différents régimes d'atomisation primaire mécanique en fonction de la vitesse d'injection, et variation de la longueur de rupture du jet. Sources : Meyers [194] (initialement dans Reitz [226]) et Faeth [90]. 27
2.3 Représentation schématique du jet liquide pour l'analyse de stabilité linéaire. 28
2.4 Classification morphologique de l'atomisation aérodynamique d'un jet liquide selon Chigier et Farago [43]. 29
2.5 Visualisations expérimentales de l'atomisation d'un jet d'eau par un écoulement d'air co-axial pour différentes conditions d'injection. Images issues de Lasheras et al. [165]. 30
2.6 Classification des régimes d'atomisation de jets coaxiaux en fonction de J et de Re_g, d'après Leroux et al. [175]. Symboles noirs : résultats expérimentaux de Leroux et al. [175]. Symboles gris : résultats expérimentaux de Chigier et Farago [43]. Symboles blancs : résultats expérimentaux de Hopfinger et Lasheras [140]. 31
2.7 Développement de l'instabilité transverse en superposition de l'instabilité longitudinale selon Marmottant et Villermaux [186]. 31
2.8 Profil de vitesse discontinu (analyse de stabilité de Kelvin-Helmholtz) et continu (analyse de stabilité de Rayleigh). 32

3.1 Forme de la distribution pour une variable ξ : distribution gaussienne et sa limite d'écart-type nul, la distribution de Dirac. 61
3.2 Simulation d'un croisement sans collisions de particules de même taille, en fonction de la reconstruction en vitesse. De gauche à droite : deux vitesses, Gaussien Anisotrope, monocinétique. Issu de Doisneau [71]. 62
3.3 Représentation de la fonction de distribution en taille dans le modèle bi-fluide. 64
3.4 Échantillonnage de la fonction de distribution en taille dans la méthode multi-classe. 66
3.5 Représentation de la fonction de distribution en taille dans les méthodes sectionnelles. Gauche : un moment en taille (OSM). Droite : deux moments en tailles (TSM). 67
3.6 Schéma illustrant la difficulté du couplage entre les formalismes des méthodes à interface (gauche) et des méthodes particulaires (droite). 69

4.1 Environnement de calcul CEDRE. 75

4.2 Simulation de la configuration Mascotte avec dard liquide artificel. . . . 76
4.3 Illustration de la stratégie de couplage CHARME-SPIREE sur la configuration MASCOTTE. Phase gazeuse en rouge, phase liquide en bleu. Exposant "CH" : solveur CHARME. Exposant "SP" : solveur SPIREE. Lignes pointillées vertes : couplages inter-solveurs. . . . 77

5.1 Représentation schématique de la cascade énergétique et des approches DNS, LES et RANS. . . 89
5.2 Signal temporel d'une variable quelconque de l'écoulement en un point de l'espace, suivant les approches RANS, LES et DNS. . . . 90
5.3 Evolution de grandeurs physiques en fonction de la température pour l'oxygène liquide suivant la loi d'état de liquide compressible. . . . 104

7.1 Notations et hypothèses du modèle d'évaporation. . . . 121
7.2 Régimes de fragmentation secondaire induite par la traînée d'après PILCH et ERDMAN [213]. . . . 124
7.3 Principe du schéma SRST en sectionnel avec reconstruction affine d'après SIBRA [251]. . . . 127

8.1 Cellule de calcul polyédrique quelconque dans CEDRE. . . . 133
8.2 Structure de la solution du problème de Riemann pour les équations d'Euler 1D. . . . 136
8.3 Combinaisons possibles dans la solution du problème de Riemann pour les équations d'Euler 1D. 137
8.4 Hypothèses sur la configuration des ondes dans les solveurs HLL (gauche) et HLLC (droite). . . 138
8.5 Combinaisons possibles de la solution du problème de Riemann pour les équations de la phase dispersée. . . . 142

9.1 Détermination des points pivots amont $\boldsymbol{H}_{ij}^{-}$ et aval $\boldsymbol{H}_{ij}^{+}$ en 2D. . . . 161
9.2 Détermination du point pivot aval $\boldsymbol{H}_{ij}^{+}$ en 3D. . . . 162
9.3 Illustration de l'algorithme 3D pour déterminer le point pivot amont $\boldsymbol{H}_{ij}^{-}$. . . . 162
9.4 Fonction switch, limiteurs pivots et limiteur hybride. . . . 172
9.5 Motifs de maillage G_1, G_2 et G_3. . . . 175
9.6 Motifs de maillage G_4, G_5 et G_6. . . . 175
9.7 Représentation des solutions initiales discontinue et régulière dans un repère (x, y, u). . . . 175
9.8 Erreurs en norme L^1, cas discontinu, maillages G_1 et G_2. . . . 176
9.9 Erreurs en norme L^1, cas discontinu, maillages G_3 et G_4. . . . 176
9.10 Erreurs en norme L^1, cas discontinu, maillages G_5 et G_6. . . . 177
9.11 Erreurs en norme L^1 et L^∞, cas régulier, maillage G_1. . . . 178
9.12 Erreurs en norme L^1 et L^∞, cas régulier, maillage G_2. . . . 178
9.13 Erreurs en norme L^1 et L^∞, cas régulier, maillage G_3. . . . 179
9.14 Erreurs en norme L^1 et L^∞, cas régulier, maillage G_4. . . . 179
9.15 Erreurs en norme L^1 et L^∞, cas régulier, maillage G_5. . . . 180
9.16 Erreurs en norme L^1 et L^∞, cas régulier, maillage G_6. . . . 180
9.17 Maillage 3D hexahèdrique. . . . 182
9.18 Trajectoire de la solution initiale. . . . 182
9.19 Solution finale dans le plan (XY) avec les schémas LG (gauche) et GM-CFL-Hyb (droite). . . . 182
9.20 Solution finale dans le plan (XZ) avec les schémas LG (gauche) et GM-CFL-Hyb (droite). . . . 183
9.21 Solution finale dans le plan (YZ) avec les schémas LG (gauche) et GM-CFL-Hyb (droite). . . . 183
9.22 Échantillon du maillage non structuré utilisé pour le cas-test du canal à Mach 3 avec une marche. 184
9.23 Schéma FOU, maillage grossier. . . . 185
9.24 Schéma LG, maillage grossier. . . . 185
9.25 Schéma GM-CFL-Hyb, maillage grossier. . . . 185
9.26 Schéma GM-CFL-Hyb, maillage fin. . . . 186
9.27 Échantillon du maillage non structuré utilisé pour le cas-test du jet liquide. . . . 186
9.28 Niveaux de densité pour le mélange liquide-gaz avec le schéma FOU (en haut) et le schéma GM-CFL-Hyb (en bas). Valeur min : $\rho_{min} = 1.17$. Valeur max : $\rho_{max} = 999.8$. . . . 187
9.29 Niveaux de fraction massique de liquide avec le schéma FOU (en haut) et le schéma GM-CFL-Hyb (en bas). . . . 188

10.1 Forme de la fonction d'efficacité λ_A en fonction de la fraction massique de l'espèce liquide dans CHARME. Échelle linéaire (gauche) et logarithmique (droite). . . . 195
10.2 Illustration des possibilités pour la modélisation des gouttes créées : grandeurs moyennes ou distributions uniques (bas niveau de précision). . . . 196
10.3 Illustration des possibilités pour la modélisation des gouttes créées : grandeurs moyennes ou distributions dynamiques (haut niveau de précision). . . . 196

10.4 Illustration de l'indépendance du diamètre des gouttes atomisées à la masse transférée et au volume des cellules du maillage. . . . 200
10.5 Représentation schématique des profils de vitesse et de fraction massique de liquide à travers l'interface diffuse. . . . 201
10.6 Forme de la fonction d'efficacité $\lambda_C^{(k)}$. Échelle linéaire (gauche) et logarithmique (droite). . . . 203
10.7 Schéma de principe du cas étudié pour l'analyse de la variation de pression. . . . 205
10.8 Discriminant Δ de l'équation du second degré (10.58) en fonction de ξ et de α_l^n. Mélange diphasique air-eau. . . . 208
10.9 Rapport P^{n+1}/P^n en fonction de α_l^n et de ξ. Mélange diphasique air-eau. . . . 208
10.10 Variation relative de pression $(P^n - P^{n+1})/P^n$ en fonction de α_l^n et de $\xi < 0$ (atomisation primaire). Mélange diphasique air-eau. . . . 209
10.11 Variation relative de pression $(P^{n+1} - P^n)/P^n$ en fonction de α_l^n et de $\xi > 0$ (pseudo-coalescence). Mélange diphasique air-eau. . . . 209
10.12 Discriminant Δ de l'équation du second degré (10.58) en fonction de ξ et de α_l^n. Mélange diphasique hydrogène-oxygène. . . . 210
10.13 Rapport P^{n+1}/P^n en fonction de α_l^n et de ξ. Mélange diphasique hydrogène-oxygène. . . . 211
10.14 Variation relative de pression $(P^n - P^{n+1})/P^n$ en fonction de α_l^n et de $\xi < 0$ (atomisation primaire). Mélange diphasique hydrogène-oxygène. . . . 211
10.15 Variation relative de pression $(P^{n+1} - P^n)/P^n$ en fonction de α_l^n et de $\xi > 0$ (pseudo-coalescence). Mélange diphasique hydrogène-oxygène. . . . 212
10.16 Géométrie 2D du banc Mascotte et maillage non structuré utilisé. . . . 217
10.17 Méthodologie d'estimation de la longueur de dard liquide : masquage du champ de fraction volumique de la phase liquide dans CHARME et calcul de la surface résultante. . . . 217
10.18 Champs instantanés de la fraction volumique de liquide dans CHARME, pour $\boldsymbol{t = 0}$, $\boldsymbol{t = 0.001}$ et $\boldsymbol{t = 0.002}$ secondes. Comparaison des simulations ***S1*** et ***S2*** (sans et avec couplage). . . . 218
10.19 Évolution temporelle de la longueur de dard liquide (critère $\boldsymbol{\alpha_{seuil} = 1}$). Comparaison des simulations ***S1*** et ***S2*** (sans et avec couplage). . . . 218
10.20 Champs instantanés de la fraction volumique de liquide dans CHARME, pour $\boldsymbol{t = 0.003}$, $\boldsymbol{t = 0.004}$ et $\boldsymbol{t = 0.005}$ secondes. Comparaison des simulations ***S1*** et ***S2*** (sans et avec couplage). . . . 219
10.21 Évolution temporelle de la pression maximale (gauche) et moyenne (droite). Comparaison des simulations ***S1***, ***S2*** et ***S3***. . . . 219
10.22 Champs instantanés à $\boldsymbol{t = 0.0013}$ s de la fraction volumique totale de la phase dispersée. Comparaison des simulations ***S2*** et ***S3*** (avec ou sans modèle de pseudo-coalescence). . . . 220
10.23 Évolution temporelle du maximum de fraction volumique de la phase dispersée. Comparaison des simulations ***S2*** (valeur totale et par section) et ***S3*** (valeur totale). . . . 220
10.24 Champs instantanés de la vitesse du fluide CHARME en échelle logarithmique (haut), et de la vorticité en échelle linéaire (milieu) et logarithmique (bas). En superposition : deux isocontours de fraction volumique de la phase liquide dans CHARME. Simulation ***S2*** à l'instant final $\boldsymbol{t = 0.005}$ s. 221
10.25 Champs instantanés du terme source de transfert liquide-liquide $\boldsymbol{S_M^l = S_{M_C}^l - S_{M_A}^l}$ et de la fraction volumique totale de la phase dispersée. En superposition : deux isocontours de fraction volumique de la phase liquide dans CHARME. Simulation ***S2*** à l'instant final $\boldsymbol{t = 0.005}$ s. . . . 222
10.26 Évolution temporelle des fractions volumiques : phase liquide dans CHARME et les trois sections de la phase dispersée. Simulation ***S2*** pour $\boldsymbol{t = 0}$ et $\boldsymbol{t = 0.001}$ secondes. . . . 223
10.27 Évolution temporelle des fractions volumiques : phase liquide dans CHARME et les trois sections de la phase dispersée. Simulation ***S2*** pour $\boldsymbol{t = 0.002}$ et $\boldsymbol{t = 0.003}$ secondes. . . . 224
10.28 Évolution temporelle des fractions volumiques : phase liquide dans CHARME et les trois sections de la phase dispersée. Simulation ***S2*** pour $\boldsymbol{t = 0.004}$ et $\boldsymbol{t = 0.005}$ secondes. . . . 225

11.1 Géométrie 3D du banc Mascotte au point de fonctionnement A-10. Vue d'ensemble à gauche et zoom sur l'injecteur à droite (vue de dessus laissant apparaitre les injections latérales d'hélium). 229
11.2 Maillage 3D non structuré tétraédrique. Vue en coupe globale et zoom sur l'injecteur. . . . 229
11.3 Évolution temporelle de la pression et de la température du fluide CHARME : valeurs minimales (pression uniquement), maximales et moyennes. . . . 232
11.4 Évolution temporelle des valeurs maximales de la fraction volumique de la phase dispersée (solveur SPIREE) : sections 1 à 3 et somme sur les sections. . . . 232
11.5 Longueur de dard liquide en fonction de $\boldsymbol{\alpha_{seuil}}$. Comparaison avec la simulation 2D du chapitre 10 sur un maillage plus fin. . . . 233
11.6 Évolution de la longueur de dard liquide au cours du temps ($\boldsymbol{\alpha_{seuil}} = 0{,}99$). . . . 233

11.7 Température moyenne du fluide CHARME et localisation des profils radiaux pour comparaison avec les données DRASC expérimentales. . . . 234
11.8 Profils radiaux de température issus du champ moyen et comparaison avec les données DRASC expérimentales. Pourcentages : taux de validation des mesures. Barres d'erreur : écarts-types des mesures instantanées. . . . 235
11.9 Vitesse moyenne du fluide CHARME en échelle logarithmique. . . . 235
11.10 Masse volumique moyenne du fluide CHARME en échelle logarithmique. . . . 236
11.11 Fraction massique moyenne d'oxygène liquide. . . . 237
11.12 Fraction massique moyenne d'oxygène gazeux. . . . 237
11.13 Fraction massique moyenne d'hydrogène gazeux. . . . 237
11.14 Fraction massique moyenne de vapeur d'eau. . . . 237
11.15 Fraction massique moyenne du radical OH. . . . 238
11.16 Fraction massique moyenne du radical O. . . . 238
11.17 Fraction massique moyenne du radical H. . . . 238
11.18 Fraction massique moyenne du radical OH issue de la simulation (à gauche) comparée à une visualisation expérimentale obtenue par déconvolution (VINGERT [289]). . . . 238
11.19 Fraction massique moyenne d'hélium. . . . 238
11.20 Fraction volumique de la section 1. . . . 240
11.21 Fraction volumique de la section 2. . . . 240
11.22 Fraction volumique de la section 3. . . . 240
11.23 Fraction volumique totale. . . . 240
11.24 Terme source de transfert liquide-liquide $S^l_M = S^l_{M_C} - S^l_{M_A}$. . . . 240
11.25 Température de la section 1. . . . 241
11.26 Débit d'évaporation de la section 1. . . . 241
11.27 Température de la section 2. . . . 241
11.28 Débit d'évaporation de la section 2. . . . 241
11.29 Température de la section 3. . . . 241
11.30 Débit d'évaporation de la section 3. . . . 241
11.31 Nombre de Weber de la section 1. . . . 242
11.32 Fréquence de fragmentation de la section 1. . . . 242
11.33 Nombre de Weber de la section 2. . . . 242
11.34 Fréquence de fragmentation de la section 2. . . . 242
11.35 Nombre de Weber de la section 3. . . . 242
11.36 Fréquence de fragmentation de la section 3. . . . 242
11.37 Localisation des 6 capteurs pour comparaison avec les données expérimentales de GICQUEL et al. [106], représentation de la ligne pour le tracé des distributions en taille, et visualisation du champ de fraction volumique totale à l'instant final $t = 17$ ms. . . . 243
11.38 Évolution temporelle du D_{30} en chacun des 6 capteurs. . . . 244
11.39 Évolution temporelle (dans la période de prise de moyenne) des vitesses moyennes des gouttes sur les 6 capteurs. . . . 245
11.40 Reconstruction sectionnelle affine en variable surface : trois configurations possibles dans une section d'après SIBRA [251]. . . . 246
11.41 Distributions des diamètres de gouttes le long de la ligne tracée sur la Figure 11.37, à $t = 17$ ms (1/6). . . . 247
11.42 Distributions des diamètres de gouttes le long de la ligne tracée sur la Figure 11.37, à $t = 17$ ms (2/6). . . . 247
11.43 Distributions des diamètres de gouttes le long de la ligne tracée sur la Figure 11.37, à $t = 17$ ms (3/6). . . . 247
11.44 Distributions des diamètres de gouttes le long de la ligne tracée sur la Figure 11.37, à $t = 17$ ms (4/6). . . . 248
11.45 Distributions des diamètres de gouttes le long de la ligne tracée sur la Figure 11.37, à $t = 17$ ms (5/6). . . . 248
11.46 Distributions des diamètres de gouttes le long de la ligne tracée sur la Figure 11.37, à $t = 17$ ms (6/6). . . . 248
11.47 Évolution temporelle de la pression du fluide au point $(X, Y, Z) = (350, 0, 0)$ mm. . . . 250
11.48 Densité spectrale de puissance (dB) du signal de pression au point $(X, Y, Z) = (350, 0, 0)$ mm. Fenêtre rectangulaire entre $t = 12,48$ et $t = 14,74$ ms (4 périodes). . . . 250
11.49 Évolution du champ de pression instantanée dans le plan (XY). . . . 251
11.50 Évolution du champ de pression instantanée dans le plan (XY). . . . 252

11.51 Comparaison entre une iso-surface de fraction massique d'oxygène liquide (valeur $\boldsymbol{Y_l = 0,95}$) issue de la simulation et une photographie expérimentale obtenue par FDIDA et al. [95]. 253
11.52 Représentation du dard liquide (iso-surface $\boldsymbol{\alpha_l = 0,99}$) et du champ de température (volume rendering) au cours du temps (1/2). 254
11.53 Représentation du dard liquide (iso-surface $\boldsymbol{\alpha_l = 0,99}$) et du champ de température (volume rendering) au cours du temps (2/2). 255

B.1 Discrétisation de l'espace des tailles et différentes distributions possibles dans un intervalle de taille. 272
B.2 Représentation de l'espace des tailles dans le modèle bi-fluide. 277
B.3 Représentation de l'espace des tailles dans le modèle multi-classes. 279
B.4 Différentes représentations de l'espace des tailles dans la méthode sectionnelle : constante par morceaux, affine ou exponentielle. 281

D.1 Schéma de principe du cas étudié. 294
D.2 Fonction $f_T^{\infty}\left(\widetilde{M},\widetilde{\gamma},\widetilde{T}\right)$ (échelle linéaire). 302
D.3 Fonction $f_P^{1}\left(\widetilde{M},\widetilde{\gamma},\widetilde{T}\right)$ (échelle linéaire). 303
D.4 Fonction $f_P^{\infty}\left(\widetilde{M},\widetilde{\gamma},\widetilde{T}\right)$ (échelle linéaire). 304
D.5 Fonction $f_T^{\infty}\left(\widetilde{M},\widetilde{\gamma},\widetilde{T}\right)$ (échelle logarithmique). 305
D.6 Fonction $f_P^{1}\left(\widetilde{M},\widetilde{\gamma},\widetilde{T}\right)$ (échelle logarithmique). 306
D.7 Fonction $f_P^{\infty}\left(\widetilde{M},\widetilde{\gamma},\widetilde{T}\right)$ (échelle logarithmique). 307
D.8 Itérations successives de l'algorithme de Newton pour le cas **LOx-H2**. 310
D.9 Itérations successives de l'algorithme de Newton pour le cas **LOx-H2O**. 310
D.10 Valeurs convergées des fonctions f_T et f_P en fonction de T_A. 311
D.11 Valeurs convergées des fonctions f_T et f_P en fonction de P_0. 311
D.12 Valeurs convergées des fonctions f_T et f_P en fonction de α_0. 312
D.13 Valeurs convergées des fonctions f_T et f_P en fonction de β_0. 312

E.1 Goutte évaporante dans un mélange gazeux figé à l'infini. Représentation des films thermiques et massiques. 320
E.2 Modèle de chauffage et évaporation découplés. Zoom sur la période de chauffage. 328
E.3 Modèle général avec équilibre ("Abramzon-Sirignano"). Zoom sur la période de chauffage. 328
E.4 Modèle général en non équilibre ("Cinétique d'évaporation"). Zoom sur la période de chauffage. 329
E.5 Modèle de chauffage et évaporation découplés. 329
E.6 Modèle général avec équilibre ("Abramzon-Sirignano"). 330
E.7 Modèle général en non équilibre ("Cinétique d'évaporation"). 330
E.8 Modèle hybride, $\epsilon_{sat} = 0K$. Zoom sur la période de chauffage. 332
E.9 Modèle hybride, $\epsilon_{sat} = 0.5K$. 332
E.10 Modèle hybride, $\epsilon_{sat} = 0.1K$. 333
E.11 Modèle hybride, $\epsilon_{sat} = 0K$. 333
E.12 Configuration numérique de la fin d'évaporation. 335
E.13 Résultats obtenus sur le cas-test de LAFON et al. [163]. 338

Introduction

La propulsion spatiale constitue un domaine de recherche actif depuis la seconde moitié du XX^{ème} siècle. Il existe différents modes de propulsion ayant chacun leurs propres avantages et inconvénients. A l'heure actuelle, la très grande majorité des moteurs-fusées sont des ***moteurs à réaction anaérobie***, utilisant le principe de la ***propulsion chimique***. Contrairement aux véhicules automobiles ou aéronautiques, les lanceurs spatiaux utilisant ce type de moteurs emportent à la fois leur comburant et leur carburant, et peuvent donc fonctionner en dehors de l'atmosphère. L'énergie chimique libérée lors de la combustion est transformée en énergie cinétique lorsque les produits de combustion à haute enthalpie sont accélérés à travers une tuyère, fournissant ainsi la poussée nécessaire. Des méthodes de propulsion spatiale alternatives ont bien été développées ou imaginées, mais elles restent très marginales (propulsion électrique, ionique ou nucléaire) voire purement théoriques (voile solaire à propulsion photonique). Les moteurs-fusées à propulsion chimique, qui équipent donc la très grande majorité des lanceurs spatiaux développés à travers le monde, peuvent être classés en deux grandes catégories :

- les moteurs à ***propulsion solide*** sont constitués d'un bloc de poudre (le ***propergol***) contenant à la fois le comburant et le carburant de la réaction chimique, percé par un canal longitudinal qui sert de chambre de combustion, et à la sortie duquel se trouve une tuyère. Les moteurs à propergol solide permettent d'obtenir une poussée très importante à un coût relativement bas. Ils sont les plus simples à mettre en œuvre, nécessitent peu d'entretien et de préparation, peuvent être stockés plusieurs années et sont faciles à transporter. Leur principal inconvénient tient au fait qu'une fois allumés, il n'est plus possible de stopper la combustion. De plus, ils sont difficilement réallumables et orientables, et leur poussée est également difficilement modulable.

- les moteurs à ***propulsion liquide*** sont plus efficaces que les moteurs à propergol solide en terme d'impulsion spécifique [1], et leur poussée peut être plus facilement modulée et orientée. Ils sont néanmoins plus complexes à concevoir et à utiliser. Les ***ergols*** (le combustible et le comburant) sont conservés séparément sous forme liquide et injectés dans la chambre de combustion grâce à de puissantes turbopompes. Un certain nombre de couples d'ergols peuvent être utilisés, parmi lesquels on distingue les ergols ***hypergoliques*** [2] des ergols ***non hypergoliques*** et les ergols ***stockables*** des ergols ***cryogéniques***. Les ergols stockables peuvent être maintenus à l'état liquide dans les conditions ambiantes, sur de longues périodes et sans précautions particulières concernant leur isolation thermique. Les ergols cryogéniques doivent eux être conservés à très basse température, ce qui implique des contraintes technologiques plus importantes. C'est le cas en particulier de l'association ***oxygène liquide - hydrogène liquide*** (LO_x-LH_2), qui constitue le couple d'ergols le plus performant et alimente notamment les moteurs Vulcain, HM-7B et Vinci de la famille Ariane.

En outre, ces deux types de propulsion sont généralement associés sur un même lanceur. La propulsion des fusées Ariane 5 est ainsi assurée au décollage par un premier étage constitué de moteurs à propergol solide, relayés ensuite par des moteurs à ergols liquides cryotechniques qui équipent les étages supérieurs. Parmi les domaines de recherche actuels, des moteurs associant directement ces deux types de propulsion sont même développés, et on parle alors de ***propulsion hybride*** [3].

1. L'impulsion spécifique représente le temps pendant lequel un kilogramme de combustible est capable d'élever une masse d'un kilogramme dans le champ gravitationnel terrestre. Plus l'impulsion spécifique est élevée, plus le système propulsif est efficace (cf. Chapitre 1).

2. Les ergols sont dits hypergoliques si la combustion s'initie spontanément dès lors qu'ils sont mis en contact, sans qu'aucun système d'allumage ne soit nécessaire.

3. C'est par exemple le moyen de propulsion qu'a retenu la société Virgin Galactic pour développer l'avion suborbital SpaceShipTwo, destiné au tourisme spatial.

Cette thèse s'inscrit dans le contexte spécifique de la ***propulsion liquide***, et plus particulièrement des ***moteurs-fusées cryotechniques*** utilisant le couple d'ergols $\boldsymbol{LO_x\text{-}LH_2}$. Dans ces moteurs, la mise en contact des ergols dans la chambre de combustion est assurée par un ensemble d'***injecteurs coaxiaux***, à l'aval desquels les phénomènes physiques mis en jeu peuvent être très différents selon les conditions de fonctionnement. La pression qui règne dans la chambre de combustion constitue notamment un paramètre déterminant. Lorsqu'elle est inférieure aux pressions critiques des ergols, l'écoulement en sortie des injecteurs coaxiaux est ***diphasique***. Le jet central d'oxygène liquide issu de chaque injecteur est pulvérisé par un écoulement annulaire d'hydrogène gazeux à très haute vitesse. L'hydrogène, bien que stocké sous forme liquide, se retrouve en effet à l'état gazeux à l'issue de son long trajet dans le système d'alimentation, nécessaire au refroidissement de la chambre de combustion. Ce phénomène d'***atomisation primaire*** du jet d'oxygène liquide conduit à la formation de gouttelettes dont l'évaporation permet d'alimenter la combustion en phase gazeuse avec l'hydrogène. En revanche, lorsque la pression de la chambre de combustion est supérieure aux pressions critiques des ergols, l'écoulement n'est plus diphasique, l'oxygène et l'hydrogène se trouvant dans un état supercritique. Il n'y a alors ni atomisation primaire, ni évaporation à proprement parler, et les mécanismes physiques sont très différents.

Dans le cadre de cette thèse, nous nous intéressons uniquement aux moteurs cryotechniques fonctionnant en ***régime subcritique***, lorsque l'écoulement est ***diphasique*** et que l'***atomisation primaire*** du jet d'oxygène liquide joue un rôle essentiel. En effet, l'efficacité de l'atomisation primaire a un impact direct sur la granulométrie de la phase dispersée résultante. Elle conditionne donc la vitesse d'évaporation des gouttes, ce qui influe sur l'efficacité de la combustion et finalement sur la poussée du moteur.

Le développement des moteurs-fusées, notamment cryotechniques, a longtemps reposé sur des méthodes de conception empiriques, sur la base de l'expérience accumulée lors des essais et des lancement successifs. Les ingénieurs ne disposaient pas d'une connaissance théorique détaillée de l'ensemble des phénomènes qui se produisent au sein de ces moteurs et des mécanismes qui régissent leurs interactions. Dans le courant des années 1980, cependant, les lanceurs Ariane subirent un certain nombre d'incidents, en partie imputés aux étages cryotechniques. Certains d'entre eux furent notamment provoqués par des ***instabilités de combustion***, phénomène dont les mécanismes d'apparition et d'amplification étaient mal connus et restent aujourd'hui mal maîtrisés. Les problèmes rencontrés pendant cette période mirent en évidence le manque de connaissances théoriques à propos des phénomènes physiques à l'œuvre dans les moteurs cryotechniques, ainsi que le ***besoin en outils numériques*** capables de simuler leur fonctionnement, améliorer leur fiabilité, et finalement d'une manière générale ***optimiser leur performance***.

Cette prise de conscience a motivé la mise en place de programmes de recherche coordonnés par les différents acteurs du secteur spatial. Initiée à la fin des années 1980, cette coopération aboutit en 1993 à la création du Groupement de Recherche (GDR) "Combustion dans les moteurs fusées", associant le CNES, la SEP (aujourd'hui rattachée à SAFRAN), le CNRS et l'ONERA. Il s'agissait d'acquérir une connaissance des phénomènes physiques liés, entre autres, à l'atomisation primaire des jets d'oxygène liquide et à la combustion des brouillards de gouttes. Dans le cadre du GDR, l'ONERA développa dès 1994 le banc d'essai Mascotte pour l'étude de la combustion cryotechnique (HABIBALLAH et al. [124]). Celui-ci permit rapidement de conduire des essais représentatifs des conditions réelles de fonctionnement des moteurs. Face à ce succès, le GDR fut reconduit en 1997 dans le but d'enrichir encore les données expérimentales, et ainsi permettre la validation des modèles et des outils numériques. Les différentes campagnes d'essai ont confirmé que l'atomisation primaire joue un rôle primordial, mais il est également apparu que tous les phénomènes physiques sont ***très fortement couplés***, ce qui en complique encore la compréhension et la modélisation. Au tournant des années 2000, une dizaine d'années de recherches sur la combustion cryotechnique a permis d'établir une importante base de données expérimentale, mise à disposition des modélisateurs et développeurs de codes de calcul (VINGERT et al. [290–292]). Toutefois, certaines données restent encore difficiles à acquérir, notamment en raison de la difficulté de l'accès optique dans les régions denses de l'écoulement diphasique, précisément là où se déroule l'atomisation primaire.

La simulation numérique de la combustion cryotechnique en régime subcritique a longtemps reposé sur l'approche dite ***Statistique Eulérienne Lagrangienne*** (SEL). La phase gazeuse réactive et turbulente était décrite selon une approche eulérienne classique, d'après les équations de Navier-Stokes. Quant à la phase liquide, elle n'était décrite que ***sous sa forme dispersée*** en adoptant un point de vue lagrangien. Des modèles de couplage permettaient de décrire l'interaction entre les phases, notamment l'évaporation des gouttes qui alimente la combustion de la phase gazeuse. Le grand avantage de cette approche est qu'elle permet une modélisation très fine de la phase dispersée, en prenant en compte beaucoup de phénomènes physiques et en décrivant des distributions éventuellement étendues en taille, vitesse et température des gouttes. En revanche, son inconvénient majeur est qu'elle ne

permet pas de décrire le jet d'oxygène liquide et sa pulvérisation, c'est-à-dire la région où l'écoulement diphasique est dit ***à phases séparées***. En effet, l'approche statistique lagrangienne est fondamentalement contrainte par l'hypothèse de particules sphériques dispersées, qui n'est évidemment pas valide dans cette région de l'écoulement. Dans l'approche SEL, les conditions initiales des gouttes ne pouvaient donc pas être prédites par le calcul, et les gouttes étaient injectées à partir d'une condition limite sensée représenter la position moyenne du dard liquide. L'approche SEL a fini par montrer ses limites dans la mesure où elle ne permet pas d'étudier des phénomènes tels que les instabilités de combustion. Celles-ci sont en effet provoquées par un couplage entre différents mécanismes, parmi lesquels l'atomisation primaire joue probablement un rôle majeur. C'est pourquoi est apparue la nécessité de mettre en place des modèles capables de décrire l'ensemble de l'écoulement liquide, depuis son injection sous forme compacte jusqu'à l'évaporation des gouttelettes et en passant par l'atomisation, le tout dans un contexte réactif.

Les premiers travaux en ce sens ont été réalisés à la fin des années 1990, par des auteurs qui s'intéressaient alors à l'atomisation des jets liquides issus des injecteurs automobiles (VALLET et al. [275]). Ils ont proposé une formulation totalement eulérienne du problème, dite à ***fluide homogène***, dans laquelle les deux phases sont vues comme deux espèces différentes d'un même fluide. En ajoutant une équation pour la densité d'aire interfaciale, ils ont obtenu pour la première fois un modèle capable de décrire la phase liquide depuis l'injection jusqu'à l'atomisation primaire et l'évaporation. Leurs travaux ont ensuite été repris et enrichis par un certain nombre d'auteurs, et appliqués à différents domaines, dont la combustion cryotechnique (POUROUCHOTTAMANE [218], JAY et al. [149], MEYERS [194]). Néanmoins, si cette formulation a permis une amélioration certaine grâce à la prise en compte de l'atomisation primaire, elle ne permet pas de décrire avec précision l'écoulement à phase dispersée. Dans cette zone de l'écoulement, les modèles spécifiques basés sur des considérations statistiques restent les plus adaptés.

C'est sur la base de cette constatation que ces travaux de thèse ont été initiés. Ils visent à ***mettre en place une stratégie de couplage entre des modèles bien adaptés à la description de l'écoulement diphasique à phases séparées d'une part, et à phase dispersée d'autre part***. L'objectif est ainsi d'améliorer la description des écoulements diphasiques issus de l'atomisation des jets liquides dans un environnement réactif, dont les moteurs-fusées cryotechniques constituent un exemple d'application parmi d'autres, mais qui nous intéresse au premier plan. Par ailleurs, ces travaux de thèse s'inscrivent également dans le contexte du développement d'une plateforme logicielle à vocation industrielle, en l'occurrence le ***code CEDRE*** développé par l'ONERA. Il s'agit d'un code de simulation multi-physiques pour le domaine de l'énergétique, orienté autour de plusieurs solveurs dédiés à des phénomènes physiques spécifiques. Le solveur principal résout les équations de Navier-Stokes compressibles et multi-espèces, avec termes sources chimiques et modèles de turbulence de type RANS ou LES. La discrétisation des équations repose sur la méthode des volumes finis en maillages non structurés généraux.

La stratégie que nous allons mettre en place doit donc être adaptée aux spécificités et capacités du code CEDRE. Ainsi, elle consiste précisément en un couplage eulérien-eulérien entre un modèle à ***interface diffuse*** de type ***fluide homogène*** ou ***4 équations***, utilisé pour décrire l'écoulement diphasique à ***phase séparées*** (écoulement gazeux réactif et jet d'oxygène liquide dense), et un ***modèle cinétique eulérien*** basé sur une ***approche sectionnelle*** de la distribution en taille pour décrire l'écoulement à ***phase dispersée***. Toutes ces notions seront précisées dans la Partie I. Cette démarche constitue un challenge rendu difficile par les conditions sévères qui règnent dans les moteurs cryotechniques, où les forts gradients de température, de vitesse et de densité, mettent à l'épreuve la robustesse des méthodes numériques. En plus de l'aspect modélisation physique, il s'agira donc également d'élaborer des méthodes numériques précises et robustes, permettant de mener à bien les simulations.

Le manuscrit est organisé en trois parties, chacune étant divisée en plusieurs chapitres comme illustré sur la Figure 1. La Partie I permet d'abord une présentation détaillée du contexte et des problématiques de la propulsion cryotechnique (voir le Chapitre 1 à l'issue duquel le plan du manuscrit est réintroduit), ainsi qu'une revue bibliographique sur l'atomisation des jets liquides, que ce soit du point de vue de l'analyse théorique et expérimentale (cf. Chapitre 2) ou de celui de la modélisation numérique (cf. Chapitre 3).

Sur la base des éléments introduits dans la Partie I, la Partie II présente la stratégie mise en œuvre dans cette thèse et la justifie au regard des spécificités du code CEDRE (cf. Chapitre 4). En l'occurrence, il s'agit de mettre en place un couplage entre les solveurs CHARME et SPIREE de CEDRE, respectivement dédiés à la description de l'écoulement diphasique à phases séparées et à phase dispersée. Les systèmes d'équations retenus sont ensuite introduits et décrits en détail (cf. Chapitre 5 et Chapitre 6), de même que les modèles physiques et les méthodes numériques utilisés (cf. Chapitre 7 et Chapitre 8). Sont présentés ici uniquement les modèles et méthodes classiques, ou tout du moins ayant été développés préalablement ou parallèlement à ces travaux de thèse. Outre

ceux-ci, cette Partie II permet de mettre en évidence des besoins spécifiques en nouveaux modèles et nouvelles méthodes, nécessaires à la mise en place de la stratégie de couplage retenue.

Ces nouveaux modèles et méthodes ont été développés et mis en œuvre dans le cadre de cette thèse, c'est pourquoi ils sont présentés spécifiquement dans la Partie III. Le Chapitre 9 présente ainsi une nouvelle méthode d'interpolation MUSCL de type multipente pour maillages non structurés généraux. Celle-ci a permis d'améliorer la robustesse des schémas numériques de CEDRE en présence d'écoulements diphasiques, et a fait l'objet de la publication LE TOUZE et al. [169]. Le Chapitre 10 décrit la modélisation proposée pour les nouveaux termes de couplage entre les solveurs CHARME et SPIREE. Le rôle de ces termes est d'assurer la transition entre les zones d'écoulement à "phases séparées" et à "phase dispersée", et ils constituent donc un modèle d'atomisation primaire. Pour clôturer la Partie III, cette stratégie globale est finalement appliquée au Chapitre 11 à la simulation numérique du banc d'essai cryotechnique Mascotte, précisément à son point de fonctionnement subcritique A-10. A noter que les premiers développements de la stratégie de couplage et les applications à la simulation du banc Mascotte ont été présentés dans LE TOUZE et al. [171] et MURRONE et al. [199]. Enfin, un certain nombre de compléments bibliographiques et d'analyse des modèles sont reportés dans les Annexes.

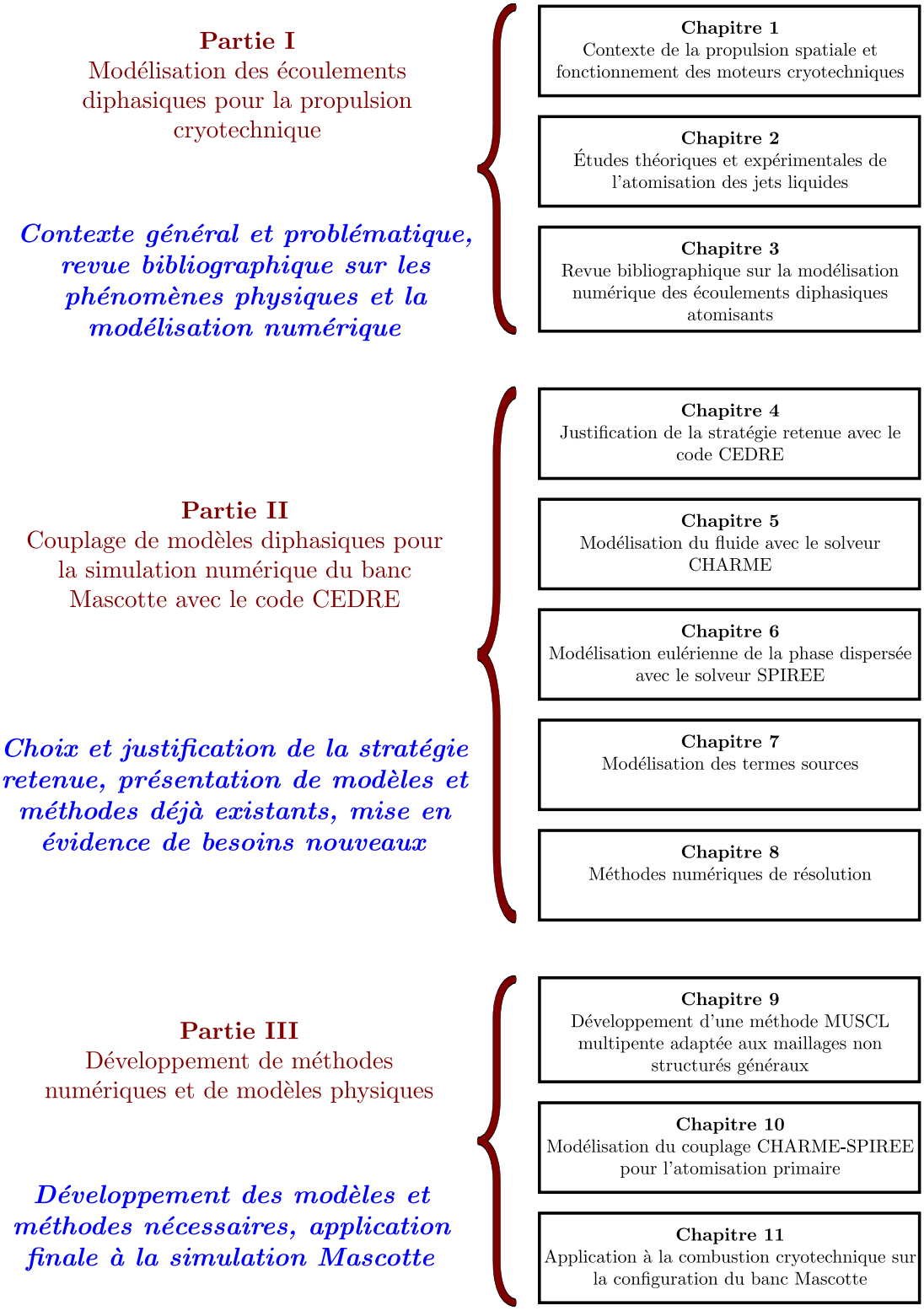


Figure 1 – ***Organisation du manuscrit et démarche suivie.***

Première partie

Modélisation des écoulements diphasiques pour la propulsion cryotechnique

Chapitre 1

Contexte de la propulsion spatiale et fonctionnement des moteurs cryotechniques

Ce premier chapitre vise à présenter les problématiques et les enjeux des moteurs-fusées à ergols liquides cryotechniques. Après un bref rappel historique sur la propulsion spatiale, le fonctionnement de ces moteurs est décrit. L'accent est mis sur les phénomènes physiques qui se déroulent en régime subcritique, lorsque l'écoulement est diphasique. Nous mettons en évidence l'intérêt de la simulation numérique pour l'étude des moteurs cryotechniques, en même temps que nous soulignons ses nombreux écueils. Cela permet de situer le contexte de notre étude, d'en préciser les objectifs, et finalement de réintroduire le plan du manuscrit.

Sommaire

1.1 Historique de la propulsion spatiale 11
1.1.1 Genèse des programmes spatiaux soviétiques et américains 11
1.1.2 Développement du programme spatial français puis européen 11
1.2 Paramètres caractéristiques de la propulsion 14
1.3 Fonctionnement des moteurs-fusées cryotechniques 16
1.3.1 Recherche expérimentale en combustion cryotechnique : le banc MASCOTTE 17
1.3.2 Description des mécanismes physiques en sortie des injecteurs coaxiaux cryotechniques fonctionnant en régime subcritique 20
1.3.3 La simulation numérique pour l'étude de la combustion cryotechnique 21

1.1 Historique de la propulsion spatiale

Avant de devenir une réalité dans la seconde moitié du XX^{ème} siècle, la conquête spatiale est d'abord née dans l'imagination d'écrivains de science-fiction. A la fin du XIX^{ème} siècle, des auteurs comme Jules Verne et H.G. Wells furent parmi les premiers à poser les bases théoriques du voyage dans l'espace. Quelques années plus tard, un savant russe du nom de Constantin Tsiolkovski apporta la première contribution scientifique majeure. Dans son livre *L'exploration de l'espace cosmique par des engins à réaction* (1903), Tsiolkovski décrit avant l'heure le principe des fusées à ergols liquides. Il est le premier à proposer d'utiliser un mélange d'oxygène et d'hydrogène pour propulser une fusée jusque dans le vide spatial grâce au principe d'action-réaction. Un certain nombre des propositions technologiques qu'il a formulées furent effectivement suivies des décennies plus tard.

1.1.1 Genèse des programmes spatiaux soviétiques et américains

Le développement de l'astronautique moderne doit beaucoup aux circonstances de la guerre. Le célèbre missile balistique V2 développé par les Allemands à l'occasion de la seconde guerre mondiale fonctionnait ainsi grâce à un moteur-fusée à ergols liquides. Dès la fin de la guerre, la technologie du V2 fut récupérée par les vainqueurs Américains et Soviétiques, qui s'en inspirèrent largement pour développer leurs propres fusées. Par la suite, le contexte hautement compétitif de la guerre froide favorisa le développement rapide de nouvelles technologies des deux côtés du rideau de fer. D'un point de vue militaire stratégique, il s'agissait pour chaque camp d'acquérir au plus vite les technologies d'armement les plus avancées. Mais la compétition ne s'établissait pas que sur le terrain purement militaire. Il était aussi question de prestige national, avec la volonté partagée d'être à la pointe de la conquête spatiale. L'URSS fut ainsi la première puissance à réussir le lancement d'un satellite artificiel, Spoutnik, le 4 octobre 1957. Ce sont également les Soviétiques qui envoyèrent le premier Homme dans l'espace, Youri Gagarine, le 12 avril 1961. Les États-Unis répondent le 21 juillet 1969, quand Neil Armstrong devient le premier Homme à poser le pied sur la Lune. Par ailleurs, les programmes spatiaux américain et soviétique étaient chacun portés par une figure charismatique. Du côté américain, il s'agit de Wernher von Braun, ingénieur allemand inventeur du missile V2. Il développa la fusée Saturn V qui transporta par exemple les célèbres missions lunaires Apollo 11 et Apollo 13. Dans le camp soviétique, l'ingénieur responsable du programme spatial se nomme Sergueï Korolev. Il en prend la tête à la fin des années 1950, après avoir consacré ses travaux d'après-guerre au développement de missiles balistiques. C'est notamment lui qui développa la famille de lanceurs Soyouz.

1.1.2 Développement du programme spatial français puis européen

L'histoire du programme spatial français débute également après la seconde guerre mondiale. Si la France ne parvient pas à récupérer la technologie du missile V2, elle embauche en revanche plus d'une centaine de spécialistes allemands qui seront affectés à un nouveau centre de recherche, créé pour la circonstance à Vernon, le LRBA [1]. Les chercheurs allemands du LRBA développent la fusée-sonde Véronique, qui constitue le premier lanceur français. Propulsée par un moteur à ergols liquides, elle est utilisée pour mener des expériences scientifiques en haute atmosphère. Cependant, le programme spatial français n'est réellement lancé qu'en 1961, avec la création du Centre National d'Études Spatiales (CNES), puis la mise en place du programme dit des "pierres précieuses". Celui-ci est né de la synergie entre les besoins militaires (développement d'un missile nucléaire à longue portée) et les besoins civils (création d'un lanceur de satellites). Il conduira à la conception successive de plusieurs fusées, chacune permettant de consolider un nouvel aspect technologique. Les fusées Émeraude, Saphir, et Rubis notamment, apportèrent ainsi chacune une contribution à l'élaboration d'un lanceur plus complet, nommé Diamant A1. Celui-ci permit la mise en orbite en 1965 d'Astérix, le premier satellite artificiel français. La connaissance acquise grâce au programme Diamant est à l'origine des succès futurs du programme européen Ariane.

Naissance du programme Ariane

Les années 1960 voient apparaitre dans une Europe fraîchement créée la volonté de développer un programme spatial commun. C'est ainsi que le projet Europa voit le jour sous l'égide de l'ELDO (European Launcher Development Organisation), consortium européen créé en 1962 et qui donnera naissance à l'Agence Spatiale Européenne (ESA) en 1975. Le projet Europa s'avéra être un échec et fut stoppé en 1972. Néanmoins, il a ouvert la voie aux succès futurs du projet Ariane, initié dès 1973. Le programme Ariane fut principalement contrôlé et financé par la France, le CNES en étant le maître d'œuvre. L'objectif à l'époque est d'acquérir une certaine autonomie vis-à-vis des technologies américaines et soviétiques. Le projet Ariane a pu bénéficier des installations du pas de tir de Kou-

1. Le Laboratoire de Recherches Balistiques et Aérodynamiques, dont les activités de propulsion ont donné naissance ensuite à la Société Européenne de Propulsion (SEP) puis à la Snecma, intégrée aujourd'hui au groupe SAFRAN.

rou, inauguré en 1968, dont la localisation à proximité de l'équateur présente un avantage pour placer des satellites commerciaux en orbite géostationnaire.

La première version d'Ariane est lancée en 1979. La fusée Ariane 1 comprend alors trois étages, pour une hauteur totale de 47 mètres et un poids de 210 tonnes. Elle produit une poussée de 240 tonnes, ce qui lui permet de placer en orbite géostationnaire des satellites pesant jusqu'à 1700 kg. Au début des années 1980, la concurrence des lanceurs américains Delta et Atlas conduit les dirigeants du programme Ariane à développer de nouvelles versions d'Ariane, capables d'emporter davantage de charge utile. Les premiers vols respectifs d'Ariane 2 et d'Ariane 3 ont lieu en 1986 et en 1984, pouvant emporter une charge utile de 2,2 et 2,7 tonnes respectivement. Ces deux versions connaissent un succès relatif et sont peu utilisées, en raison de l'arrivée d'Ariane 4 en 1988. Commercialisée dans six configurations différentes, Ariane 4 peut placer entre 2 et 4,3 tonnes de charge utile en orbite de transfert géostationnaire. Cette version a connu 116 lancements entre 1988 et 2003, pour seulement 3 échecs.

FIGURE 1.1 – ***Les différentes versions du lanceur Ariane. Crédits : CNES / ESA / D.Ducros.***

D'un point de vue technique, toutes les versions d'Ariane 1 à Ariane 4 partageaient la même structure à trois étages, visible sur la Figure 1.1. Le premier étage était équipé de quatre moteurs Viking à ergols stockables (hypergoliques), le deuxième étage était équipé d'un seul moteur Viking, enfin le troisième étage utilisait le moteur cryogénique HM-7 (puis HM-7B). Le lanceur Ariane 3 était équipé de deux lanceurs supplémentaires à poudre, tandis qu'Ariane 4 utilisait un nombre variable de propulseurs d'appoint, de deux à quatre, à propergol liquide ou solide.

Développement d'Ariane 5

La décision de construire le lanceur Ariane 5 est prise en 1985, avec pour objectif initial de permettre le placement de charges lourdes en orbite basse. Cependant, lorsqu'il est apparu que le poids des futurs satellites de communication géostationnaires dépasserait les capacités d'Ariane 4, il fut décidé qu'Ariane 5 serait son successeur dès 1995. Le premier vol d'Ariane 5 a lieu en réalité en 1996 et se solde par un échec, tout comme le second en 1997. La fiabilité s'améliore largement par la suite, et en mars 2014 seuls 4 échecs sont recensés sur les 73 lancements effectués par Ariane 5.

D'un point de vue technique, Ariane 5 constitue une rupture par rapport aux versions précédentes d'Ariane. Il s'agit d'un lanceur à l'architecture simplifiée, conçu dès le départ de manière à pouvoir augmenter progressivement ses performances, et rester ainsi opérationnel et compétitif pendant de nombreuses années. Plusieurs versions successives ont été développées, la version encore utilisée en 2014 pour les lancements commerciaux étant la version Ariane 5 ECA (cf. Figure 1.2 et Figure 1.3). Ce lanceur a une hauteur totale de 56 mètres et une masse au décollage comprise entre 760 et 780 tonnes. La charge utile est inférieure à 10 tonnes pour un lancement sur une orbite de transfert géostationnaire, et peut monter jusqu'à 20 tonnes pour un placement en orbite basse. La poussée produite au décollage dépasse les 1300 tonnes. Comme le montre la Figure 1.3, le lanceur Ariane 5 ECA

FIGURE 1.2 – *Décollage d'un lanceur Ariane 5 ECA le 1er juillet 2009. Crédits : CNES / ESA / Arianespace.*

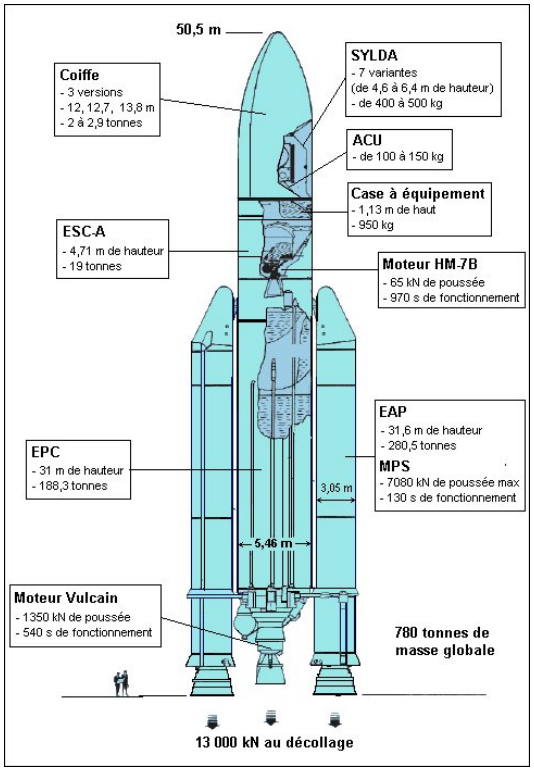


FIGURE 1.3 – *Les différents étages du lanceur Ariane 5 ECA. Crédits : Arianespace.*

est composé des éléments suivants :

- L'étage principal cryotechnique (EPC) est composé de deux réservoirs contenant les ergols liquides et du moteur cryogénique Vulcain 2. Il utilise 160 tonnes d'hydrogène et d'oxygène liquides refroidis respectivement à 20 K et 90 K. L'EPC est mis à feu dès le décollage pour des raisons de sécurité, mais il n'assure seul la propulsion du lanceur qu'après le largage des étages d'accélération à poudre. Il fonctionne pendant neuf minutes, après avoir brûlé 173 tonnes d'ergols et fournit une poussée de 1350 kN.
- Les étages d'accélération à poudre (EAP) fournissent l'essentiel de la poussée au décollage pendant une durée de 140 secondes. Sur le modèle ECA, il s'agit de deux boosters P241 mesurant 31 mètres de haut pour 3 mètres de diamètre, et placés autour de l'EPC. Chaque propulseur est constitué d'un tube métallique contenant plus de 240 tonnes de propergol solide, ainsi que d'une tuyère divergente. Ils fournissent une poussée maximale avoisinant les 7000 kN chacun.
- L'étage supérieur cryotechnique (ESC) permet d'assurer une mise sur orbite de la charge utile avec une précision maximale. Il est constitué d'un moteur cryotechnique HM-7B. Il s'agit d'une version plus puissante des moteurs HM-7 qui équipaient le troisième étage des lanceurs Ariane 1 à Ariane 4. Il est prévu que les moteurs HM-7B soient remplacés par le nouveau moteur Vinci sur les futures versions d'Ariane 5 et sur Ariane 6. Le moteur Vinci sera plus puissant et plus performant, et présentera également l'avantage d'être réallumable, contrairement au moteur HM-7B. Il est toujours en cours de développement en 2014.
- La charge utile comprend un ou deux satellites, protégés par une coiffe. Celle-ci sert à protéger la charge utile des frottements de l'air lors du vol dans l'atmosphère. Elle est larguée une fois sortie de l'atmosphère, peu après les EAP.

Évolutions futures : vers Ariane 6

Au moment où ces lignes sont écrites (septembre 2014), l'évolution du programme Ariane est très incertaine et sujette à de nombreuses discussions entre les différents acteurs du secteur. Les paragraphes ci-dessous résument donc les perspectives du moment, sans présumer de ce que seront les décisions finales.

En l'état actuel des choses, un nouveau lanceur Ariane 6 doit remplacer Ariane 5 à l'horizon 2021. L'objectif est de disposer d'un lanceur plus compétitif qu'Ariane 5 afin de faire face à une concurrence internationale de plus

en plus forte, avec notamment l'arrivée du lanceur Falcon 9 développé par la société privée américaine SpaceX. Si la nécessité de développer Ariane 6 fait peu débat, en revanche le consensus est beaucoup plus difficile à trouver en ce qui concerne les solutions technologiques retenues. Une première configuration, soutenue par l'ESA, est nommée Ariane 6 PPH pour "Poudre Poudre Hydrogène" (cf. Figure 1.4). Dans cette version, les deux premiers étages utiliseraient des moteurs à propergol solide. Le premier étage serait équipé de trois moteurs et le deuxième étage d'un seul, chaque moteur étant chargé de 145 tonnes de propergol. Le troisième étage utiliserait le moteur cryogénique Vinci.

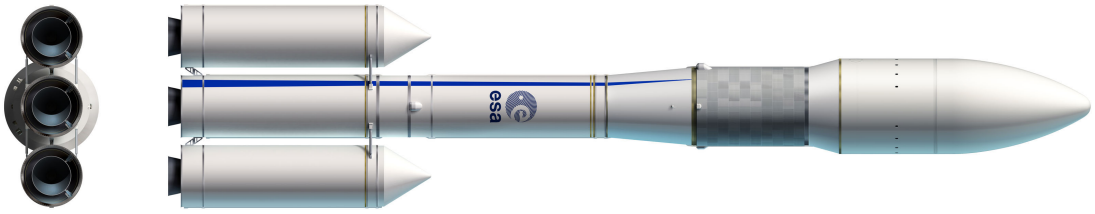


FIGURE 1.4 – ***Version Ariane 6 PPH "multi P linéaire". Crédits : ESA / D.Ducros.***

Cependant, en juin 2014, une contreproposition est formulée par les industriels Airbus et Safran. Cette solution alternative, nommée Ariane 6 PHH pour "Poudre Hydrogène Hydrogène", reprendrait l'architecture d'Ariane 5 mais en réduisant la taille de l'EPC et des EAP. Les deux boosters à poudre seraient ainsi les P145 prévus pour la version PPH d'Ariane 6 à la place des boosters P241 utilisés sur Ariane 5 ECA, tandis que l'EPC embarquerait toujours le moteur cryotechnique Vulcain 2. Toujours selon la proposition des industriels, la version PHH d'Ariane 6 serait déclinée en deux versions différentes, en fonction de la constitution du dernier étage. La version PHH 6.1 embarquerait un Étage Supérieur Cryotechnique (ESC) utilisant le nouveau moteur Vinci. Il s'agit de la version lourde, destinée au lancement de satellites de télécommunication vers l'orbite géostationnaire. Une version légère nommée PHH 6.2 embarquerait un Étage à Propergols Stockables (EPS) à la place du moteur Vinci. Elle serait plutôt destinée aux lancements de satellites institutionnels en orbite basse.

En septembre 2014, le CNES remet à l'ESA une nouvelle proposition tentant de concilier au mieux les différentes contraintes : développer un lanceur à la fois modulable et à bas coût, tout en continuant de faire travailler les acteurs industriels européens du secteur. Ainsi la propulsion liquide ne serait-elle plus abandonnée comme cela fut proposé initialement. Selon cette proposition, Ariane 6 serait une version réduite et améliorée d'Ariane 5 : des EAP plus petits, un EPC équipé d'une version améliorée et moins chère du moteur Vulcain 2, un ESC composé du nouveau moteur Vinci. De plus, le lanceur se déclinerait en deux versions différentes suivant le nombre de boosters. La version Ariane 6-2, équipée de deux moteurs à poudre, permettrait de placer une charge utile de 5 tonnes en orbite de transfert géostationnaire pour un coût de lancement de 75 millions d'euros. La version Ariane 6-4, équipée de quatre moteurs à poudre, permettrait de placer une charge utile de 11 tonnes en orbite de transfert géostationnaire pour un coût de lancement de 90 millions d'euros. La première version serait dédiée aux satellites légers institutionnels, tandis que la seconde serait utilisée pour lancer des satellites commerciaux plus lourds, ou bien deux satellites de moyenne taille en une seule mission.

Quelle que soit la solution finalement retenue, l'arrivée d'Ariane 6 sur le marché des lanceurs n'est pas attendue avant 2021. Avant cela, et pour pallier provisoirement à certaines limites actuelles d'Ariane 5 ECA, une dernière version d'Ariane 5 doit être mise en service d'ici 2018. Cette version, nommée Ariane 5 ME (Midlife Evolution), reprend les caractéristiques d'Ariane 5 ECA mais en équipant l'ESC du nouveau moteur Vinci en remplacement du moteur HM-7B.

1.2 Paramètres caractéristiques de la propulsion

Considérons le cas d'un moteur-fusée quelconque équipé d'une tuyère de Laval (convergente - divergente), telle que celle représentée schématiquement sur la Figure 1.5. Sous certaines hypothèses simplificatrices, les équations de la dynamique des gaz permettent d'établir rapidement certains des paramètres caractéristiques de la propulsion. Pour commencer, l'écoulement dans la tuyère est supposé unidimensionnel et isentropique. En outre, la vitesse des gaz dans la chambre de combustion est supposée négligeable, si bien que les conditions en entrée de la tuyère (et donc en sortie de chambre de combustion) correspondent à des grandeurs d'arrêt [2], indicées ci-dessous "0". La

2. On parle aussi de conditions génératrices ou de grandeurs totales.

conservation de l'enthalpie h entre l'entrée et une section quelconque de la tuyère s'écrit

$$h = c_p T_0 = c_p T + \frac{1}{2} U^2 \,, \tag{1.1}$$

où c_p désigne la chaleur spécifique à pression constante du gaz, que l'on suppose ici constante, T et U désignant la température et la vitesse au niveau de la section quelconque. On introduit le coefficient isentropique $\gamma = c_p/c_v$, c_v étant la chaleur spécifique à volume constant. Le gaz est supposé parfait, la vitesse du son s'exprime donc $c^2 = \gamma r T$, avec $r = R/W$, R étant la constante universelle des gaz parfaits et W la masse molaire du gaz. Il est alors possible d'écrire le rapport entre la température génératrice et la température en une section quelconque de la tuyère :

$$\frac{T_0}{T} = 1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2 \,, \tag{1.2}$$

où $M = U/c$ est le nombre de Mach. Puisque l'écoulement est supposé isentropique, nous obtenons les rapports des pressions et des masses volumiques en appliquant la loi de Laplace. Le rapport entre les vitesses du son s'obtient ensuite de manière immédiate.

$$\begin{aligned}
\frac{\rho_0}{\rho} &= \left(\frac{T_0}{T}\right)^{\frac{1}{\gamma-1}} &&= \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} M^2\right)^{\frac{1}{\gamma-1}} \\
\frac{P_0}{P} &= \left(\frac{\rho_0}{\rho}\right)^{\gamma} &&= \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} M^2\right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} \\
\frac{c_0}{c} &= \left(\frac{T_0}{T}\right)^{\frac{1}{2}} &&= \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} M^2\right)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned} \tag{1.3}$$

Un premier paramètre propulsif peut être calculé à partir des relations (1.3), il s'agit du débit massique en sortie

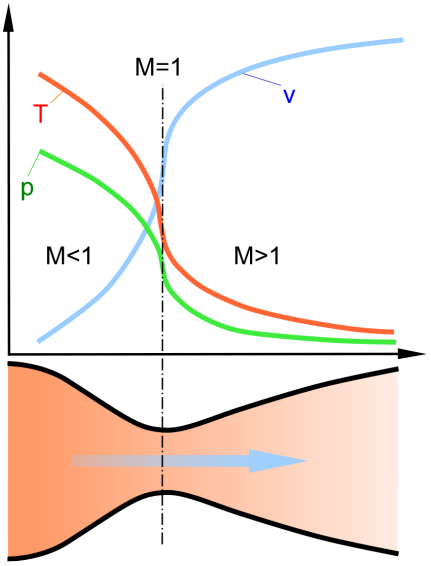


FIGURE 1.5 – ***Evolution schématique de la pression, la température et la vitesse le long d'une tuyère de Laval (source Wikipédia).***

de tuyère. Le débit massique se conserve le long de la tuyère, aussi il est pratique de le calculer au niveau de la section du col. En effet, l'écoulement est sonique au col pour une tuyère amorcée. Le débit massique peut alors s'exprimer selon la relation (1.4), où A^* désigne l'aire de la section au niveau du col, ρ^* et c^* désignant la masse volumique et la vitesse du son au col.

$$\dot{m} = A^* \rho^* c^* \tag{1.4}$$

En écrivant de manière opportune $\dot{m} = \rho_0 c_0 A^* \left(\rho^*/\rho_0\right) \left(c^*/c_0\right)$, et en appliquant les relations d'arrêt (1.3) au niveau du col sonique ($M = 1$), nous obtenons :

$$\dot{m} \;=\; A^* \; P_0 \; \gamma \left[(\gamma - 1)\, c_p T_0\right]^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{2}{\gamma + 1}\right)^{\frac{\gamma+1}{2(\gamma-1)}} \;. \tag{1.5}$$

La poussée F constitue un deuxième paramètre propulsif essentiel. Il s'agit d'une force, exprimée en newton (N) selon la relation

$$F = \dot{m} U_s + A_s \left(P_s - P_a\right) \,, \tag{1.6}$$

où A_s désigne l'aire de la section de sortie de la tuyère, P_s est la pression dans cette même section, et P_a représente la pression ambiante à l'extérieur de la tuyère. Le second terme a généralement une contribution faible devant le premier, il est même nul lorsque la tuyère est adaptée ($P_s = P_a$). La vitesse d'éjection U_s peut être exprimée également en fonction des conditions génératrices et de la pression dans la section de sortie. En utilisant la relation d'arrêt sur la pression (1.3), on extrait dans un premier temps l'expression du nombre de Mach dans la section de sortie :

$$M_s^2 = \frac{2}{\gamma - 1}\left[\left(\frac{P_0}{P_s}\right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} - 1\right] . \tag{1.7}$$

La vitesse d'éjection des gaz en sortie de tuyère suit alors simplement la relation :

$$U_s = M_s\, c_s \quad ; \quad U_s^2 = M_s^2\, c_0^2 \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M_s^2\right)^{-1} . \tag{1.8}$$

En introduisant l'expression (1.7) dans la précédente, il vient :

$$U_s^2 = \gamma r T_0 \, \frac{2}{\gamma - 1}\left[1 - \left(\frac{P_s}{P_0}\right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}}\right] . \tag{1.9}$$

L'impulsion spécifique constitue un autre paramètre caractéristique de la propulsion. Notée I_{sp}, elle est définie comme

$$I_{sp} = \frac{F}{\dot{m} g_0} , \tag{1.10}$$

où $g_0 \approx 9,81 \mathrm{m/s^2}$ désigne l'accélération de la pesanteur. Pour une tuyère adaptée, nous avons également :

$$I_{sp} = \frac{U_s}{g_0} . \tag{1.11}$$

L'impulsion spécifique représente le temps (en secondes) pendant lequel l'unité de masse de propergol est capable de déplacer une masse d'un kilogramme dans le champ gravitationnel terrestre. Plus l'impulsion spécifique est élevée, plus le système propulsif est efficace. A titre d'exemple, l'impulsion spécifique dans le vide des ergols cryogéniques du moteur Vulcain 2 est de 434 secondes.

1.3 Fonctionnement des moteurs-fusées cryotechniques

Nous abordons ici de manière plus précise le fonctionnement et la phénoménologie des moteurs-fusées à ergols liquides cryogéniques, qui constituent le contexte de cette étude. Nous avons vu que toutes les versions d'Ariane ont utilisé et utilisent des moteurs cryotechniques. La version actuelle Ariane 5 ECA embarque deux moteurs de ce type, le moteur Vulcain 2 et le moteur HM-7B (voir la Figure 1.6), ce dernier étant voué à être remplacé par le nouveau moteur cryotechnique Vinci. D'un point de vue technologique, ces moteurs fonctionnent tous globalement de la manière suivante. Les ergols sont stockés sous forme liquide à très basse température dans des réservoirs pressurisés, et sont injectés dans la chambre de combustion grâce à de puissantes turbopompes. L'injection de l'oxygène et de l'hydrogène dans la chambre se fait à travers un injecteur frontal constitué d'un nombre important d'injecteurs coaxiaux indépendants. Par ailleurs, du fait de la température élevée de la combustion dans la chambre, l'hydrogène liquide circule autour de la paroi avant son injection de manière à refroidir la chambre. Par conséquent, l'hydrogène se retrouve sous forme gazeuse au moment de son injection dans la chambre. Les caractéristiques respectives des moteurs HM-7B, Vinci et Vulcain 2 sont détaillées dans le Tableau 1.1.

Si ces moteurs sont construits sur le même modèle, leurs conditions de fonctionnement, en revanche, varient. Les phénomènes physiques qui en résultent sont alors complètement différents. Le paramètre important est la pression de chambre, à comparer aux pressions critiques de l'hydrogène et de l'oxygène. La pression et la température critiques de l'hydrogène sont en effet d'environ 13 bar et 33 K, tandis que celles de l'oxygène avoisinent les 50 bar et 154 K. Par conséquent, la pression nominale dans HM-7B s'établissant à 37 bar, l'hydrogène est dans son état supercritique mais l'oxygène reste sous forme liquide (subcritique). Dans ces conditions, la physique en sortie des injecteurs coaxiaux est celle de l'atomisation d'un jet liquide par un écoulement gazeux (cf. § 2.3). En revanche, dans le cas du moteur Vulcain 2, la pression nominale de la chambre de combustion s'établit à 115 bar. Les deux ergols brûlent alors dans leur état supercritique [3]. La physique du phénomène est complètement différente : l'interface liquide-gaz disparait et les propriétés thermodynamiques de l'oxygène sont fortement variables. Ces deux

3. L'oxygène étant injecté à une température inférieure à sa température critique, il est d'abord subcritique. Il s'échauffe ensuite, et la transition s'opère vers l'état supercritique.

FIGURE 1.6 – *Moteurs cryotechniques HM-7B et Vulcain 2. Copyright : Eric Forterre / Snecma / Safran.*

modes de fonctionnement doivent être appréhendés de manière différente, et en l'occurrence nous ne nous intéresserons dans cette étude qu'au cas de la combustion cryotechnique ***en régime subcritique***. Cela concerne donc le moteur HM-7B, mais également le moteur Vulcain 2. En effet, la combustion s'établit en premier lieu en régime subcritique lors des ***phases de fonctionnement transitoires***.

	HM-7B	**Vinci**	**Vulcain 2**
POUSSÉE DANS LE VIDE (kN)	65	180	1340
IMPULSION SPÉCIFIQUE DANS LE VIDE (S)	446	465	434
PRESSION DE COMBUSTION (bar)	37	60	115
HAUTEUR (m)	2,01	4,20	3,45
MASSE TOTALE (kg)	165	550	2100
DIAMÈTRE SORTIE DE TUYÈRE (m)	0,99	2,20	2,10
RAPPORT D'EXPANSION DE LA TUYÈRE *	83	240	58
DÉBIT D'ERGOLS (H_2 - O_2) (kg/s)	2,5 - 12,3	5,8 - 33,7	45 - 275
RAPPORT DE MÉLANGE †	4,9	5,8	6,1
VITESSE DE ROTATION MAXIMALE DES TURBOPOMPES (H_2 - O_2) (tr/min)	60000 - 13000	90000 - 18000	39800 - 13700
VITESSE D'ÉJECTION DANS LE VIDE (km/s)	4,4	4,6	4,2
NOMBRE D'INJECTEURS COAXIAUX	90	122	516
AUTRES CARACTÉRISTIQUES	-	Réallumable, divergent déployable	-

TABLEAU 1.1 – *Caractéristiques techniques des moteurs cryotechniques HM-7B, Vulcain 2 et Vinci.*

∗. Rapport entre l'aire de la section de sortie de la tuyère et l'aire du col.
†. Rapport entre le débit d'oxygène et le débit d'hydrogène.

1.3.1 Recherche expérimentale en combustion cryotechnique : le banc MASCOTTE

Nous venons de voir l'importance de la propulsion liquide cryotechnique dans la propulsion spatiale, notamment en ce qui concerne le programme Ariane. C'est dans ce contexte qu'est née à la fin des années 1980 la volonté d'étudier de manière approfondie les mécanismes intervenant dans les moteurs cryotechniques. Initiée par le CNES

et la SEP[4], cette démarche a conduit à la création en 1993 du Groupement De Recherche (GDR) "Combustion dans les moteurs-fusées", incluant l'ONERA et des laboratoires du CNRS. A cette occasion, l'ONERA initia dès 1991 le développement d'un banc d'essais dédié aux recherches sur la combustion cryotechnique, le banc Mascotte (HABIBALLAH et al. [124]), représenté sur la Figure 1.7. L'objectif, à terme, était de pouvoir reproduire le plus fidèlement possible les mécanismes qui se déroulent en sortie d'un injecteur coaxial dans les moteurs réels. Dans le cas subcritique, il s'agit des mécanismes d'atomisation primaire et secondaire du jet d'oxygène liquide, de l'évaporation des gouttes et de la combustion turbulente. Un objectif parallèle visait également le développement de méthodes de mesures et de diagnostic optique avancées.

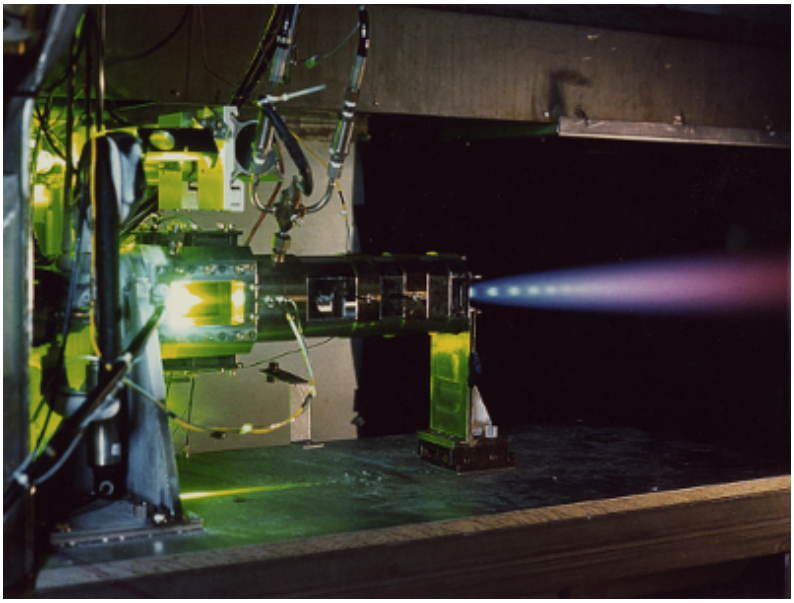


FIGURE 1.7 – ***Visualisation du banc Mascotte en fonctionnement (point A-10).***

Pour cela, Mascotte fut développé en plusieurs versions successives, se rapprochant de plus en plus des conditions de fonctionnement réelles. Les versions V01 et V02 permettaient ainsi d'atteindre une pression de 10 bar. Les premiers essais sur Mascotte V01 débutèrent en 1994, la version V02 fut mise en service l'année suivante. La version V03, mise en service en 1998, permettait d'atteindre 80 bar (VINGERT et al. [290]). Le banc Mascotte peut actuellement opérer sous un certain nombre de points de fonctionnement, qui varient selon les paramètres suivants : la pression de chambre visée, les ergols utilisés[5] et leurs débits d'injection (VINGERT et al. [291]). Nous ne détaillons ici qu'un seul de ces points de fonctionnement, lequel fera l'objet de la simulation numérique finale de cette étude. Il s'agit du point de fonctionnement A-10, dont les caractéristiques sont précisées dans le Tableau 1.2. Les paramètres J, R_m, Re_l, Re_g, We et Oh_l sont définis en § 2.1. Les indices l et g désignent ici respectivement les jets d'oxygène et d'hydrogène. Les valeurs de ces paramètres pour Mascotte (point A-10) sont proches de celles que l'on rencontre dans les moteurs réels, ce qui permet d'assurer une certaine similarité et donc la pertinence du banc.

Le point de fonctionnement A-10 de Mascotte a été choisi ici pour deux raisons. Premièrement, il s'agit d'un point de fonctionnement en régime subcritique, et par conséquent les phénomènes qui s'y déroulent sont ceux qui font l'objet de cette étude (l'écoulement est diphasique en sortie d'injecteur). Deuxièmement, parmi les points de fonctionnement en régime subcritique, c'est celui qui a fait l'objet des campagnes de mesure les plus détaillées (VINGERT et al. [292]) : imagerie par émission spontanée des radicaux OH^*, mesures de température par DRASC (Diffusion Raman Anti-Stokes Cohérente) ou PLIF (Fluorescence induite par plan laser), mesures granulométriques par PDPA (Phase Doppler Particle Analyzer) et d'autres techniques développées plus récemment (FDIDA et al. [95], FDIDA [93], FDIDA et BLAISOT [94], FDIDA et al. [96]).

Les Figure 1.8 et Figure 1.9 représentent la géométrie du boitier Mascotte en version A-10, ainsi que celle de l'injecteur. La chambre de combustion est à section carrée (50x50 mm^2). Cette configuration non axisymétrique permet d'installer plus facilement des accès optiques. Les parois latérales de la chambre sont ainsi équipées de hublots de surface 50x70 mm^2, pouvant être déplacés le long du boitier pour visualiser différentes zones de l'écoulement. Des films d'hélium circulent le long des parois des hublots pour les refroidir et permettre l'accès optique à la chambre. L'hélium est injecté à température ambiante par l'intermédiaire de deux rangées de 25 trous de 1 mm

4. Société Européenne de Propulsion, incorporée depuis à la Snecma, société du groupe SAFRAN.
5. L'oxygène liquide est toujours utilisé, généralement avec de l'hydrogène, mais des essais ont aussi été réalisés avec de l'azote, de l'hélium ou du méthane.

	O_2	H_2		O_2	H_2
DIAMÈTRE DE L'INJECTEUR (mm)	5	12	VITESSE DU SON	951	1284
DÉBIT (g/s)	50	23,7	VISCOSITÉ DYNAMIQUE $\left(\times 10^{-6}\right)$	230	8,6
VITESSE D'INJECTION	2,2	300	CONDUCTIVITÉ THERMIQUE	0,160	0.177
TEMPÉRATURE D'INJECTION	85	280	TENSION DE SURFACE * $\left(\times 10^{-3}\right)$	15	N/A
PRESSION NOMINALE (bar)	10		RAPPORT DES FLUX DE QUANTITÉ DE MOUVEMENT J	13,7	
MASSE VOLUMIQUE	1168	0,86	RAPPORT DE MÉLANGE R_m	2,1	
ÉTAT THERMODYNAMIQUE †	LIQ	GAZ	NOMBRES DE REYNOLDS Re_l, Re_g $\left(\times 10^4\right)$	5,6	9,6
ENTHALPIE (kJ/kg)	−142	3676	NOMBRE DE WEBER We $\left(\times 10^4\right)$	2,5	
CHALEUR SPÉCIFIQUE c_p	1684	14260	NOMBRE D'OHNESORGE Oh_l $\left(\times 10^{-3}\right)$	1,2	
CHALEUR SPÉCIFIQUE c_v	951	10112			

TABLEAU 1.2 – ***Données caractéristiques des ergols injectés en régime nominal pour Mascotte A-10. Unités S.I. sauf mention contraire. Données thermodynamiques : source NIST.***

∗. Donnée disponible à la saturation uniquement, c'est-à-dire pour une goutte entourée de sa propre vapeur.
†. LIQ : liquide, GAZ : gazeux

de diamètre, avec un débit total d'environ 10 g/s.

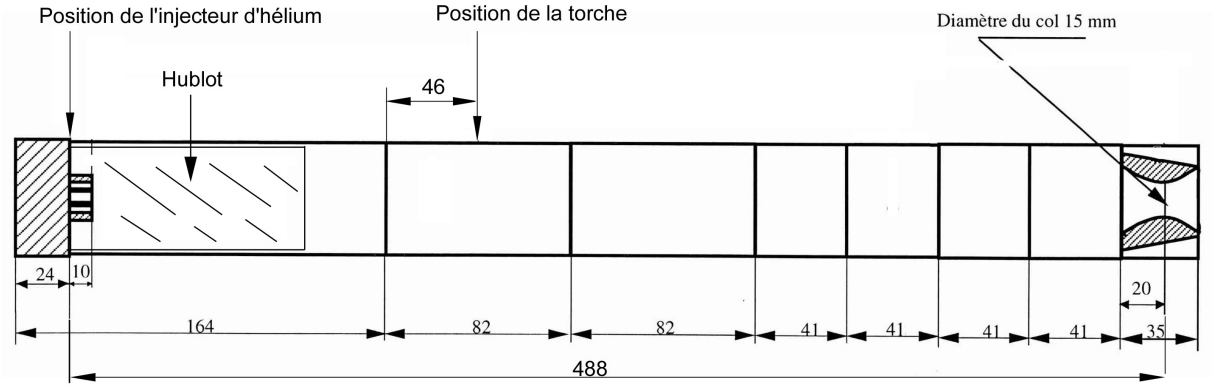
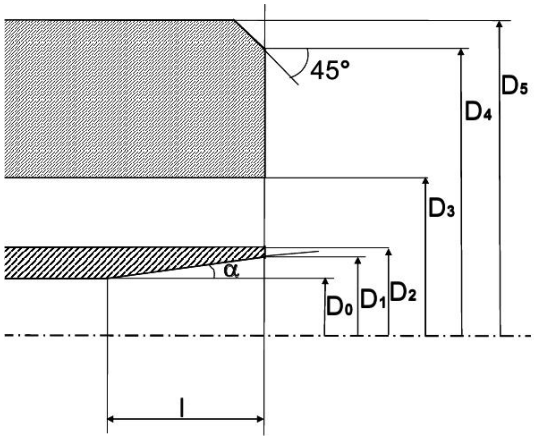


FIGURE 1.8 – ***Géométrie du banc Mascotte pour le point de fonctionnement A-10 (issu de*** **VINGERT** ***[289]).***



l = 5 mm
α = 8°
D_0 = 3,6 mm *
D_1 = 5,0 mm
D_2 = 5,6 mm
D_3 = 12 mm
D_4 = 18 mm
D_5 = 20 mm

∗. D_0, D_1... correspondent bien à des diamètres et non à des rayons, contrairement à ce que laisse supposer la figure.

FIGURE 1.9 – ***Géométrie de l'injecteur coaxial pour le point de fonctionnement Mascotte A-10.***

1.3.2 Description des mécanismes physiques en sortie des injecteurs coaxiaux cryotechniques fonctionnant en régime subcritique

Nous détaillons ici les phénomènes physiques qui se déroulent en aval des injecteurs coaxiaux cryotechniques opérant sous des conditions subcritiques, et dont une représentation schématique est donnée sur la Figure 1.10. Il s'agit par exemple du point de fonctionnement A-10 du banc Mascotte, du moteur HM-7B opérant en régime nominal, ou encore du moteur Vulcain 2 en régime transitoire. A la sortie immédiate de l'injecteur coaxial, il existe un différentiel de vitesse très important entre l'oxygène liquide et le jet co-courant d'hydrogène gazeux (voir les données du Tableau 1.2). Ce différentiel de vitesse fait naitre des instabilités hydrodynamiques à l'interface liquide-gaz (cf. § 2.3 pour plus de détails). Ces instabilités sont fortement et rapidement amplifiées, ce qui conduit à l'arrachement de structures liquides du jet principal. Ce phénomène est nommé ***atomisation primaire***, et l'on parle dans cette zone d'écoulement diphasique à ***phases séparées*** d'après la classification topologique proposée par ISHII [144]. Les structures liquides arrachées au cœur liquide ne sont pas encore des gouttes. Il s'agit d'abord de ligaments, dont la taille est encore relativement importante, et dont la forme n'est pas encore sphérique. Ensuite, lorsque les contraintes aérodynamiques exercées par l'écoulement gazeux sur les ligaments liquides deviennent supérieures aux forces stabilisatrices de tension de surface, les ligaments se fragmentent. Ce processus est nommé ***fragmentation secondaire***. Le nombre adimensionnel qui traduit la compétition entre les contraintes aérodynamiques et les forces de tension de surface est le nombre de Weber, défini en § 2.1. A mesure que la taille des inclusions liquides se réduit sous l'effet des fragmentations successives, leur forme tend à devenir sphérique sous l'effet de la tension de surface. L'ensemble des gouttelettes ainsi générées est dénommé ***spray***. On parle dans cette zone d'écoulement diphasique à ***phase dispersée***, le taux de présence moyen de la phase liquide étant très faible. Par ailleurs, l'écoulement gazeux environnant est fortement turbulent, et il s'ensuit une importante ***dispersion*** des gouttes du spray. Parallèlement à cela, les gouttes échangent de l'énergie et de la masse avec le gaz, il y a ***évaporation***. L'oxygène évaporé se retrouve sous forme gazeuse, formant ainsi en régime établi une ***flamme de diffusion*** avec l'hydrogène environnant. La combustion de l'oxygène avec l'hydrogène génère des produits de combustion à haute température. Ceux-ci, essentiellement formés de vapeur d'eau, sont ensuite évacués de la chambre à travers une tuyère convergente-divergente, où leur énergie thermique est transformée en énergie cinétique.

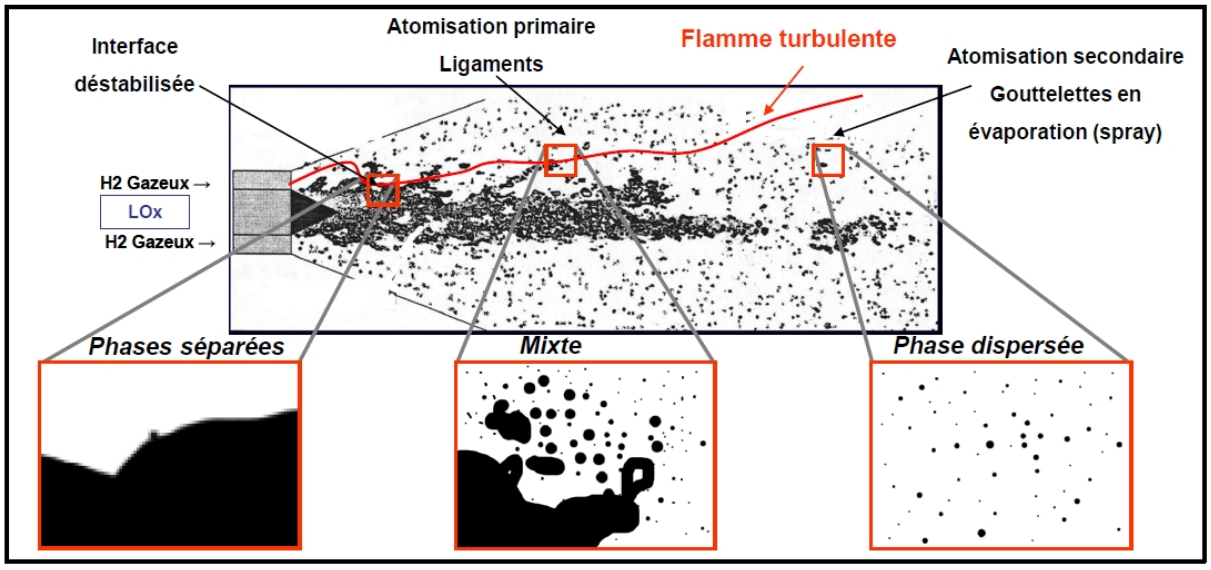


FIGURE 1.10 – ***Phénomènes en sortie d'un injecteur coaxial cryotechnique en régime subcritique.***

Ce type de configuration se caractérise donc par son caractère ***fortement multi-échelles***. Plusieurs ordres de grandeurs séparent la taille du jet liquide de celle des plus petites gouttes du spray. Ceci constitue un véritable défi pour la modélisation et la simulation numérique, comme nous le verrons au Chapitre 2. Il est important de souligner également que les différents phénomènes qui interviennent dans cette chaine de mécanismes sont ***très fortement couplés***. L'atomisation primaire puis la fragmentation secondaire, l'évaporation et enfin la combustion se déroulent à des distances très proches, et parfois même simultanément. Les gouttes s'évaporent en même temps qu'elles fragmentent, par exemple. Il existe donc sans aucun doute une action voire une rétroaction des phénomènes les uns sur les autres. Certaines interactions sont évidentes. Il est clair qu'une atomisation primaire moins efficace conduit à des gouttes moins nombreuses et de taille plus importante. Par suite, le taux d'évaporation est réduit et la combustion est moins bien alimentée en comburant [6]. D'autres interactions entre phénomènes existent. Elles sont

6. Cette observation illustre l'importance d'une atomisation primaire efficace dans les performances globales des moteurs, et donc l'impor-

parfois bien plus complexes et, par ailleurs, nuisibles.

En particulier, l'un des enjeux majeurs en propulsion liquide concerne les instabilités de combustion. Celles-ci peuvent perturber le bon fonctionnement des moteurs, à tel point qu'elles ont déjà provoqué l'échec de certains lancements. A ce titre, elles ont toujours constitué et constituent encore aujourd'hui un défi pour les concepteurs de moteurs-fusées à ergols liquides [7]. Les instabilités de combustion naissent du couplage qui peut survenir entre l'acoustique de la chambre et les différents processus conduisant à la combustion. Plus précisément, il arrive que des ondes de pression soient générées au cours du fonctionnement d'un moteur. La cause de leur apparition peut être multiple. Il peut s'agir d'ondes de pression générées par l'instabilité des couches de mélange en sortie des injecteurs (détachement tourbillonnaire). Une variation des débits d'injection des ergols est également susceptible de modifier l'atomisation du jet liquide, et par suite l'évaporation et la combustion. Dans ce cas, le dégagement de chaleur fluctue, générant ainsi des oscillations de pression. Celles-ci peuvent ensuite être entretenues et amplifiées lorsqu'elles excitent les modes propres acoustiques de la chambre. Dans ce cas, elles peuvent rétroagir sur la combustion et augmenter le dégagement de chaleur, lequel en retour alimente de nouveau l'oscillation de pression. Le processus entre alors en résonance et l'augmentation des flux de chaleur aux parois peut causer des dommages importants. Ceci n'est qu'un exemple de mécanisme d'instabilité de combustion parmi d'autres. On pourra trouver bien plus de détails à ce sujet dans de nombreuses références spécialisées, notamment dans ANDERSON et YANG [6] et CULICK et YANG [52].

Les instabilités de combustion ne font pas partie du cadre de cette étude, d'ailleurs elles n'apparaissent pas sur le point de fonctionnement A-10 du banc Mascotte. Néanmoins, elles ont été évoquées ici pour illustrer l'importance d'acquérir une compréhension globale de tous les phénomènes qui interviennent en propulsion liquide, étant donné leur caractère fortement couplé. Or, cette compréhension globale, même limitée à un seul injecteur, constitue encore actuellement un objectif à atteindre pour la communauté scientifique. Les études théoriques s'intéressent généralement aux différents phénomènes de manière indépendante. Il en existe ainsi un certain nombre qui traite de l'atomisation de jets liquides (cf. Chapitre 2), mais malheureusement le plus souvent dans des contextes non réactifs.

1.3.3 La simulation numérique pour l'étude de la combustion cryotechnique

Les expériences en combustion cryotechniques sont souvent onéreuses et complexes à mettre en œuvre, notamment en raison du caractère dangereux de la combustion oxygène-hydrogène. Par ailleurs, les expériences ne fournissent pas toujours toutes les données utiles à la compréhension des phénomènes. En raison des conditions de fonctionnement sévères, il est souvent difficile de faire des diagnostics dans la zone dense de l'écoulement et à proximité immédiate de la flamme. Disposer d'outils numériques efficaces et fiables, en complément de moyens expérimentaux, est donc un objectif essentiel pour qui cherche à optimiser et améliorer la fiabilité des dispositifs de propulsion cryotechnique. Par ailleurs, il est important de noter que la propulsion spatiale est loin d'être le seul secteur concerné par la thématique des écoulements diphasiques réactifs, que l'on retrouve dans bon nombre d'applications industrielles. Cela concerne par exemple l'industrie automobile avec l'injection diesel, les foyers aéronautiques, mais aussi d'autres procédés industriels : turbines à gaz, fours de verrerie. Aussi, disposer d'outils numériques efficaces pour simuler les écoulements diphasiques est un objectif qui embrasse davantage que la seule combustion cryotechnique.

C'est dans ce contexte que s'inscrit cette étude. Il s'agit d'apporter une contribution nouvelle à un outil de simulation numérique développé par l'ONERA (le code CEDRE, voir le Chapitre 4), avec le double objectif suivant :

- de manière générale, être capable de simuler les écoulements diphasiques, réactifs, issus de l'atomisation d'un jet liquide par un co-courant gazeux.
- en particulier, appliquer cet outil à la simulation de la combustion cryotechnique en conditions subcritiques, et permettre ainsi dans le futur l'étude détaillée de phénomènes complexes tels que l'allumage ou les instabilités de combustion hautes fréquences.

Les travaux conduits pour atteindre cet objectif sont présentés dans la suite de ce manuscrit, en respectant l'organisation suivante. Clôturant la Partie I, les Chapitre 2 et Chapitre 3 proposent une revue bibliographique de la littérature consacrée aux écoulements diphasiques "atomisants". Par ce terme, nous restreignons le cadre aux écoulements diphasiques gaz - liquide caractérisés par l'atomisation d'un jet liquide et la formation d'un spray. Le Chapitre 2 est dédié aux aspects théoriques et à la description des phénomènes physiques, tandis que le Chapitre 3 passe en revue les modèles développés pour la simulation numérique.

tance du design des injecteurs et des données d'injection des ergols.

7. La problématique des instabilités de combustion dépasse d'ailleurs le seul cadre de la propulsion liquide. Elle concerne également la propulsion solide, et même tous les dispositifs de combustion en général, en dehors des seules applications spatiales.

La stratégie globale choisie pour traiter le problème est présentée dans la Partie II, sans rentrer à ce stade dans les détails des modèles et des méthodes que nous avons développés. En quelque sorte, il s'agit de décrire du point de vue "utilisateur" la mise en place d'une simulation numérique avec un code déjà existant : les systèmes d'équations résolus par les solveurs choisis, l'expression des termes sources classiquement utilisés, les méthodes numériques déjà intégrées dans le code. Au-delà de considérations purement informatives, cette partie permet de justifier le choix de la stratégie retenue en tenant compte des spécificités de l'outil numérique déjà existant (le code CEDRE de l'ONERA). Elle permet également de mettre en évidence les différents points qui ont nécessité des développements spécifiques.

Ces développements concernent des méthodes numériques et des modèles physiques, et font l'objet de la Partie III. Une nouvelle procédure d'interpolation des variables, dans le cadre de la méthode des volumes finis utilisée dans CEDRE, est ainsi introduite au Chapitre 9. La ***méthode MUSCL multipente pour maillages non structurés généraux*** a fait l'objet de la publication LE TOUZE et al. [169]. Le Chapitre 10 est dédié à la mise en place d'un ***modèle de couplage entre solveurs pour décrire l'atomisation primaire***, que l'on applique ensuite au Chapitre 11 à la ***simulation numérique instationnaire du point de fonctionnement A-10 du banc Mascotte***. Dans la mesure du possible, les résultats obtenus sont comparés aux données expérimentales disponibles. Une attention particulière est portée aux limites actuelles et aux perspectives d'amélioration du modèle et de la stratégie globale.

Chapitre 2

Études théoriques et expérimentales de l'atomisation des jets liquides

Nous avons évoqué au Chapitre 1 l'importance de l'atomisation primaire du jet d'oxygène liquide pour le fonctionnement des moteurs cryotechniques. La formation rapide de gouttes aussi fines que possible est recherchée car elle permet d'augmenter la surface d'échange entre le liquide et le gaz, et favorise donc une évaporation rapide. Les études expérimentales et théoriques sur l'atomisation primaire visent ainsi un double objectif. D'une part, il s'agit d'acquérir une compréhension fine des phénomènes physiques, en identifiant par exemple un certain nombre de régimes différents et en expliquant quels mécanismes conduisent à la transition entre ces régimes. D'autre part, il s'agit de quantifier l'influence de certains paramètres (géométrie et nature de l'injecteur, vitesse d'injection, propriétés physiques...) sur l'efficacité de l'atomisation primaire, et permettre ainsi l'optimisation du design des injecteurs. Ce chapitre constitue une brève revue de ces études expérimentales et théoriques.

Sommaire

2.1 Nombres adimensionnels caractéristiques . . . 25
2.2 Atomisation primaire mécanique (jets libres) . . . 26
2.2.1 Classification des régimes de rupture . . . 26
2.2.2 Description des mécanismes physiques . . . 27
2.3 Atomisation primaire aérodynamique (jets assistés) . . . 29
2.3.1 Classification des régimes de rupture . . . 29
2.3.2 Description des mécanismes physiques . . . 31
2.3.3 Corrélations utiles . . . 33
2.3.4 Caractérisation de la configuration Mascotte . . . 35

Un certain nombre d'études théoriques et expérimentales ont été menées sur la physique de l'atomisation de jets liquides. Cette partie a pour but d'en présenter brièvement les points essentiels, des revues plus générales sur la physique de l'atomisation (VILLERMAUX [283]), voire sur la physique des jets liquides en général (EGGERS et VILLERMAUX [83]) sont disponibles dans la littérature.

Il existe plusieurs techniques permettant d'obtenir l'atomisation d'un jet liquide, qui se distinguent par le type d'injecteur utilisé. Nous avons vu au Chapitre 1 que les moteurs cryotechniques utilisent des injecteurs coaxiaux, l'atomisation primaire du jet liquide étant générée par le cisaillement d'un écoulement gazeux co-courant, injecté à très haute vitesse. On parle dans ce cas d'***atomisation aérodynamique*** et de ***jet assisté***. Dans l'industrie automobile, les moteurs Diesel utilisent des injecteurs pressurisés, où le carburant liquide est injecté à haute pression à travers un orifice de taille réduite dans une chambre contenant du gaz au repos. On parle alors d'***atomisation mécanique*** et de ***jet libre***. On trouve encore d'autres techniques d'atomisation, notamment l'***atomisation par impact***, où l'on fait impacter le jet liquide contre une paroi ou contre un autre jet liquide. Par ailleurs, il peut exister des variantes technologiques dans le design des injecteurs (injection radiale ou swirlée par exemple).

Dans le cadre de la propulsion cryotechnique, le champ est réduit *a priori* aux injecteurs coaxiaux et donc à l'atomisation aérodynamique. Cependant, un certain nombre de travaux théoriques et expérimentaux ont été réalisés sur l'atomisation mécanique (probablement en raison de son utilisation massive dans l'industrie automobile). Les mécanismes physiques étant assez proches de ceux qui interviennent en atomisation aérodynamique, il est intéressant de présenter les principaux résultats des études sur l'atomisation mécanique. C'est l'objet de la section § 2.2, l'atomisation aérodynamique des jets assistés étant abordée spécifiquement en § 2.3. Avant cela, nous introduisons en § 2.1 les nombres adimensionnels qui interviennent de manière générale dans la caractérisation des mécanismes d'atomisation primaire.

2.1 Nombres adimensionnels caractéristiques

Les indices l et g ci-dessous font référence aux caractéristiques du jet liquide et du jet gazeux en sortie d'injecteur (respectivement oxygène et hydrogène dans le cas d'un injecteur cryotechnique). Dans le cas de l'atomisation mécanique (jet libre), l'indice g fait référence à la phase gazeuse "au repos" en sortie de l'injecteur liquide. Certains nombres adimensionnels ne sont pertinents que pour un type d'atomisation donné. C'est le cas du rapport des flux de quantité de mouvement J, défini par la relation (2.1), qui n'a de sens que dans le cas des jets assistés.

$$\mathrm{J} = \frac{\rho_g U_g^2}{\rho_l U_l^2} \tag{2.1}$$

Des études (VILLERMAUX [285], LASHERAS et al. [165]) ont montré que ce paramètre a une importance de premier ordre dans la caractérisation des jets issus d'injecteurs coaxiaux. Il contrôle notamment la longueur de rupture du jet liquide, et à ce titre des corrélations donnant la longueur de liquide intact en fonction de J ont été établies (cf. § 2.3.3). Un autre paramètre qui n'a de sens que dans le cas des jets assistés est le rapport de mélange R_m, défini par la relation (2.2), et qui compare les débits massiques des ergols à l'injection. Ce paramètre est utilisé davantage pour caractériser la combustion [1] que l'atomisation primaire, pour laquelle on préfère utiliser le paramètre J.

$$\mathrm{R}_m = \frac{\dot{m}_l}{\dot{m}_g} \tag{2.2}$$

Les nombres de Reynolds liquide et gazeux, notés Re_l et Re_g, et définis par les relations (2.3) et (2.4), comparent les forces d'inertie aux contraintes visqueuses en sortie des injecteurs. Dans ces relations, μ_l et μ_g désignent la viscosité dynamique du liquide et du gaz. Le nombre de Reynolds gazeux n'a bien sûr de sens que pour les jets assistés. Il n'est pas défini pour les jets libres, où seul le nombre de Reynolds liquide est utilisé.

$$\mathrm{Re}_l = \frac{\rho_l U_l D_l}{\mu_l} \tag{2.3}$$

$$\mathrm{Re}_g = \frac{\rho_g U_g D_g}{\mu_g} \tag{2.4}$$

Le nombre de Weber, également appelé nombre de Weber aérodynamique, compare l'effet déstabilisateur des forces aérodynamiques (caractérisées par le différentiel de vitesse liquide-gaz) aux forces stabilisatrices de tension de surface. Il est noté We et est défini par la relation (2.5). On utilise également parfois le nombre de Weber liquide We_l, aussi appelé nombre de Weber mécanique, et défini par la relation (2.6). Dans le cas des jets libres, ces deux

1. Le rapport de mélange est équivalent au facteur d'air dans le contexte des moteurs à combustion interne, c'est-à-dire à l'inverse de la richesse (rapport du débit de combustible sur le débit de comburant).

nombres sont reliés l'un à l'autre par le rapport des densités entre le liquide et le gaz (puisque dans ce cas la vitesse U_g est nulle dans la relation (2.5)). Le coefficient de tension de surface du liquide σ_l dépend de la température et de la composition de la phase gazeuse au niveau de l'interface.

$$\mathrm{We} = \frac{\rho_g \left(U_g - U_l\right)^2 D_l}{\sigma_l} \tag{2.5}$$

$$\mathrm{We}_l = \frac{\rho_l U_l^2 D_l}{\sigma_l} \tag{2.6}$$

Le nombre de Weber liquide We_l peut être comparé au nombre de Reynolds liquide Re_l. Ceci conduit à la définition d'un nouveau nombre adimensionnel, le nombre d'Ohnesorge du jet liquide, noté Oh_l et défini en (2.7). Ce nombre compare les forces de viscosité aux forces de tension de surface.

$$\mathrm{Oh}_l = \frac{\sqrt{\mathrm{We}_l}}{\mathrm{Re}_l} = \frac{\mu_l}{\sqrt{\rho_l \sigma_l D_l}} \tag{2.7}$$

Dans les définitions ci-dessus, les diamètres D_g et D_l s'entendent comme les diamètres qui caractérisent les sections débitantes des injecteurs. Si l'on se réfère aux notations de la Figure 1.9 représentant l'injecteur coaxial de Mascotte, nous avons ainsi $D_l = D_1$ et $D_g = (D_3 - D_2)/2$.

2.2 Atomisation primaire mécanique (jets libres)

2.2.1 Classification des régimes de rupture

Différentes études expérimentales ont permis d'établir une classification des régimes d'atomisation primaire mécanique en fonction de certains des nombres adimensionnels caractéristiques définis dans la section précédente. Une synthèse de ces travaux est disponible dans FAETH [90], FAETH et al. [91] et REITZ et BRACCO [227], entre autres. La classification établie définit quatre régimes principaux, fonction des nombres adimensionnels Re_l, We, Oh_l et du rapport de densité ρ_g/ρ_l. Ces régimes, représentés sur la Figure 2.1, sont les suivants :

- Le ***régime de Rayleigh*** existe quand la vitesse d'injection du jet liquide est basse (faibles nombres de Re_l et We). Des instabilités de type Rayleigh-Taylor naissent à l'interface liquide-gaz sous l'effet des contraintes aérodynamiques (différentiel de vitesse entre le jet liquide et le gaz au repos). Lorsque ces instabilités de grande longueur d'onde excèdent les forces stabilisatrices de tension de surface, des gouttes se détachent de l'extrémité du jet. Ces gouttes ont alors un diamètre de l'ordre de celui de l'injecteur, ou même légèrement supérieur. Dans ce régime, la longueur de rupture du jet liquide croit linéairement avec la vitesse d'injection du jet (segment CD de la Figure 2.2).
- Le ***premier régime de rupture aérodynamique*** (ou First Wind-Induced Break-Up) apparait lorsque la vitesse d'injection du liquide augmente. Les gouttes qui se détachent du jet ont toujours un diamètre de l'ordre de celui de l'injecteur. En revanche, la longueur de rupture du jet liquide diminue cette fois lorsque la vitesse du jet augmente (segment EF de la Figure 2.2). Cette transition est attribuée à l'apparition d'une instabilité de cisaillement de type Kelvin-Helmholtz.
- Le ***second régime de rupture aérodynamique*** (ou Second Wind-Induced Break-up) apparait lorsque la vitesse d'injection augmente encore. A ce stade, la définition de la longueur de rupture du jet liquide devient ambigüe, et c'est pourquoi REITZ et BRACCO [227] distinguent la longueur de surface intacte [2] et la longueur de cœur intact [3]. Comme le montre la Figure 2.2, ces longueurs coïncident dans le régime de Rayleigh et le régime First-Wind Induced Break-up, mais ne coïncident plus dans les régimes suivants. On observe alors une augmentation de la longueur de cœur intact avec la vitesse d'injection (segment FH de la Figure 2.2), mais une diminution de la longueur de surface intacte (segment FG de la Figure 2.2). Dans ce régime, des gouttes sont formées à proximité immédiate de la sortie de l'injecteur, et avec un diamètre beaucoup plus petit que le diamètre de l'injecteur (REITZ et BRACCO [227]).
- Enfin, le ***régime d'atomisation*** correspond aux plus grandes valeurs de la vitesse d'injection du jet liquide. La longueur de surface intacte devient quasi-nulle (des structures liquides sont arrachées du jet dès la sortie de l'injecteur), tandis que la longueur de cœur intact diminue également avec l'augmentation de la vitesse d'injection. Ce type de régime est celui qui caractérise l'injection dans les moteurs Diesel.

2. Distance axiale à partir de laquelle on trouve les premières structures liquides complètement détachées du jet liquide principal.
3. Distance axiale à partir de laquelle toutes les structures liquides sont détachées du jet liquide principal.

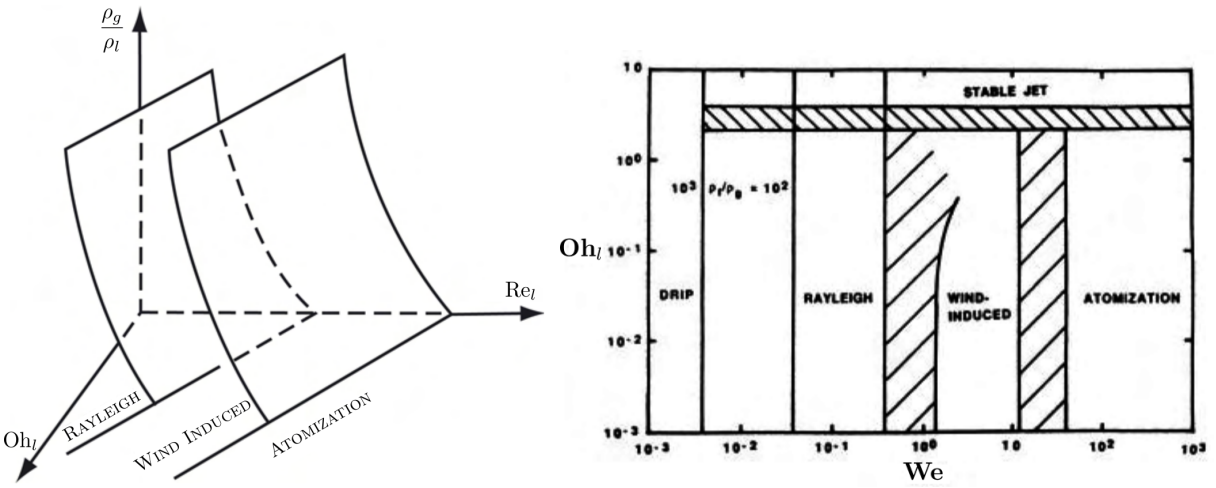


FIGURE 2.1 – *Régimes d'atomisation primaire mécanique selon* REITZ *[226] (gauche) et* FAETH *[90] (droite).*

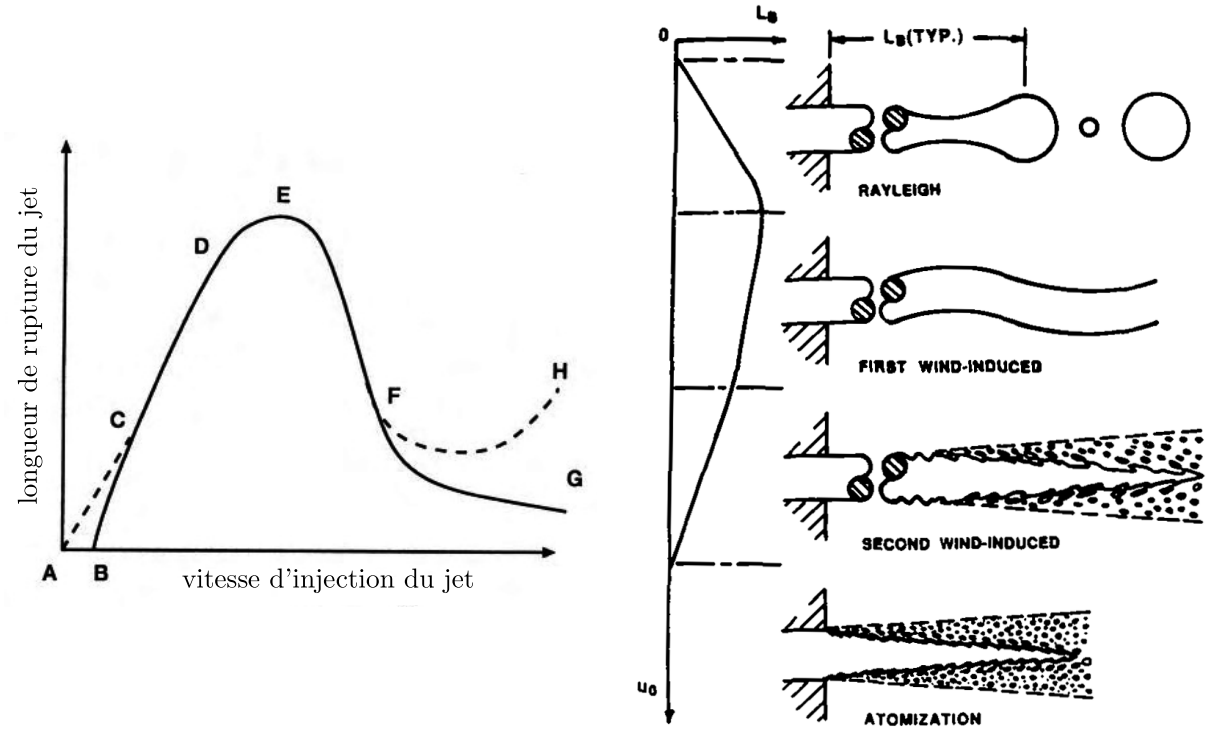


FIGURE 2.2 – *Les différents régimes d'atomisation primaire mécanique en fonction de la vitesse d'injection, et variation de la longueur de rupture du jet. Sources :* MEYERS *[194] (initialement dans* REITZ *[226]) et* FAETH *[90].*

2.2.2 Description des mécanismes physiques

L'analyse théorique des mécanismes physiques s'appuie sur la théorie linéaire des instabilités et les travaux fondateurs de RAYLEIGH [221] et PLATEAU [214], repris plus récemment par REITZ [225]. L'analyse consiste à écrire les équations de l'hydrodynamique pour le système constitué du jet liquide et de la phase gazeuse environnante, en faisant un certain nombre d'hypothèses simplificatrices. Le jet liquide est ainsi considéré comme un cylindre de longueur infinie et de rayon a (voir la Figure 2.3 pour un schéma de principe), injecté dans un environnement gazeux au repos, supposé non visqueux et incompressible. L'hypothèse de base consiste à supposer de faibles perturbations de l'interface liquide-gaz, décrites mathématiquement de la manière suivante :

$$\eta(t,z) = \eta_0\, e^{ikz+\omega t}\,, \tag{2.8}$$

où η_0 désigne l'amplitude de la perturbation initiale, et $k = 2\pi/\lambda$ est le nombre d'onde associé à la longueur d'onde λ. De plus, z est la distance axiale, t désigne le temps et i est l'unité imaginaire. Les équations de Navier-Stokes sont alors écrites en coordonnées cylindriques (r,z) pour chacune des deux phases. Par ailleurs, l'hypothèse de

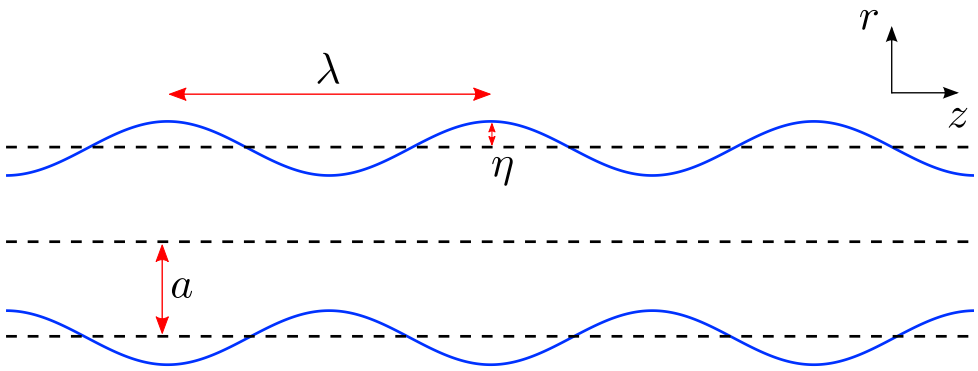


FIGURE 2.3 – ***Représentation schématique du jet liquide pour l'analyse de stabilité linéaire.***

faibles perturbations permet de les écrire sous forme linéarisée. En définissant des conditions limites à l'interface et en utilisant la loi de Laplace, la manipulation des équations de Navier-Stokes linéarisées fournit une équation de dispersion pour ω (REITZ [225]). Ce nombre complexe peut être décomposé en sa partie réelle et sa partie imaginaire, selon la relation $\omega = \omega_r + i\omega_i$. La partie réelle ω_r représente alors le taux d'accroissement de la perturbation, tandis que la partie imaginaire ω_i conduit à sa vitesse de propagation c selon la relation :

$$c = -\frac{\omega_i}{k} \,. \tag{2.9}$$

En étudiant l'équation de dispersion et ses limites asymptotiques, il est alors possible de retrouver les différents régimes de rupture du jet évoqués précédemment. Ceci permet également d'identifier les mécanismes physiques mis en œuvre dans chaque régime (REITZ et BRACCO [227]).

Par ailleurs, plusieurs études expérimentales ont permis d'évaluer l'influence de phénomènes spécifiques sur l'atomisation des jets libres. D'après la thèse de CHESNEL [42], citant lui-même l'ouvrage de référence de BAUMGARTEN [16], quatre phénomènes peuvent jouer un rôle dans l'atomisation primaire mécanique, à savoir :

- ***les forces aérodynamiques***. Le cisaillement généré par le différentiel de vitesse entre le liquide injecté et le gaz au repos est à l'origine des instabilités interfaciales évoquées précédemment. Ce mécanisme n'est significatif qu'à faible vitesse, lorsque la turbulence n'est pas ou peu développée au sein du jet liquide.
- ***la turbulence au sein du jet liquide***. La turbulence ***interne*** du jet liquide (générée par l'écoulement au sein de l'injecteur) joue un rôle important dans le développement de l'atomisation primaire, comme l'ont révélé les travaux de WU et FAETH [303] et WU et al. [304]. Il s'agit même probablement du mécanisme prépondérant pour l'atomisation des jets Diesel haute pression.
- ***la cavitation dans l'injecteur***. Il arrive parfois que la pression soit localement inférieure à la pression de vapeur saturante dans l'injecteur de liquide. Des bulles de vapeur apparaissent alors au sein du liquide et l'écoulement devient diphasique. Le développement éventuel de ce phénomène, appelé cavitation, dépend des conditions de fonctionnement et de la géométrie de l'injecteur. La cavitation modifie sensiblement la topologie de l'écoulement, de même que la turbulence. Son impact sur l'atomisation primaire est également considéré comme majeur. D'après REITZ [225], la cavitation conduit à une augmentation de l'angle du spray et à une diminution de la longueur de pénétration du jet liquide.
- ***la relaxation du profil de vitesse***. Lorsque la turbulence est pleinement développée dans l'injecteur (cas d'un grand rapport "longueur sur diamètre de sortie"), le profil de vitesse varie brusquement en sortie de l'injecteur, les contraintes visqueuses aux parois étant soudainement supprimées. Ce phénomène est susceptible de générer des instabilités à l'interface et a donc une influence notable sur l'atomisation primaire du jet, comme l'ont montré les travaux de FAETH et al. [91].

Enfin, les études expérimentales sont également utiles pour établir des corrélations prédictives en fonction des conditions opératoires. On trouve ainsi dans certains travaux (FAETH [90], FAETH et al. [91]) des corrélations expérimentales qui caractérisent l'atomisation primaire et secondaire d'un jet liquide sous pression injecté dans un gaz au repos. Elles fournissent, par exemple, la longueur de cœur liquide intact ou la distribution moyenne du diamètre et de la vitesse des gouttes du spray, en fonction des principaux paramètres adimensionnels et de la géométrie de l'injecteur. Ces corrélations sont ensuite particulièrement utiles, entre autres, pour mettre en place et / ou valider des stratégies de modélisation numérique.

2.3 Atomisation primaire aérodynamique (jets assistés)

2.3.1 Classification des régimes de rupture

Les travaux sur l'atomisation primaire aérodynamique des jets assistés ont également permis d'établir une distinction entre différents régimes. La Figure 2.4 reproduit la classification morphologique opérée par CHIGIER et FARAGO [43]. Quatre régimes sont identifiés :

- ***le régime de Rayleigh***. Il est caractérisé par une faible vitesse de l'écoulement gazeux. Des structures liquides ayant une taille de l'ordre du diamètre de l'injecteur sont détachées du jet liquide. On retrouve ici les mécanismes mis en évidence précédemment pour les jets libres, dans ce qu'on a appelé également le régime de Rayleigh.
- ***le régime de membrane***. Dans ce régime, la structure du jet en sortie de l'injecteur évolue vers celle d'une ***nappe liquide mince***. Des instabilités de type Kelvin-Helmholtz conduisent à la rupture de la membrane liquide et à la formation de gouttes dont le diamètre est bien inférieur à celui de l'injecteur.
- ***le régime de fibres***. Des fibres (ou ***ligaments***) sont formées à la surface du jet par le cisaillement de l'écoulement gazeux. Le décrochage de ces ligaments et leur fragmentation ultérieure conduit à la formation de très petites gouttes. Ce régime correspond à la description qui a été faite des phénomènes en sortie des injecteurs coaxiaux cryotechniques en § 1.3.2.
- ***le régime superpulsant***. Il s'agit d'une transition possible du régime précédent, où apparaissent des pulsations très marquées de l'atomisation du jet. Ces pulsations sont attribuées à l'interaction de recirculations gazeuses avec le jet liquide.

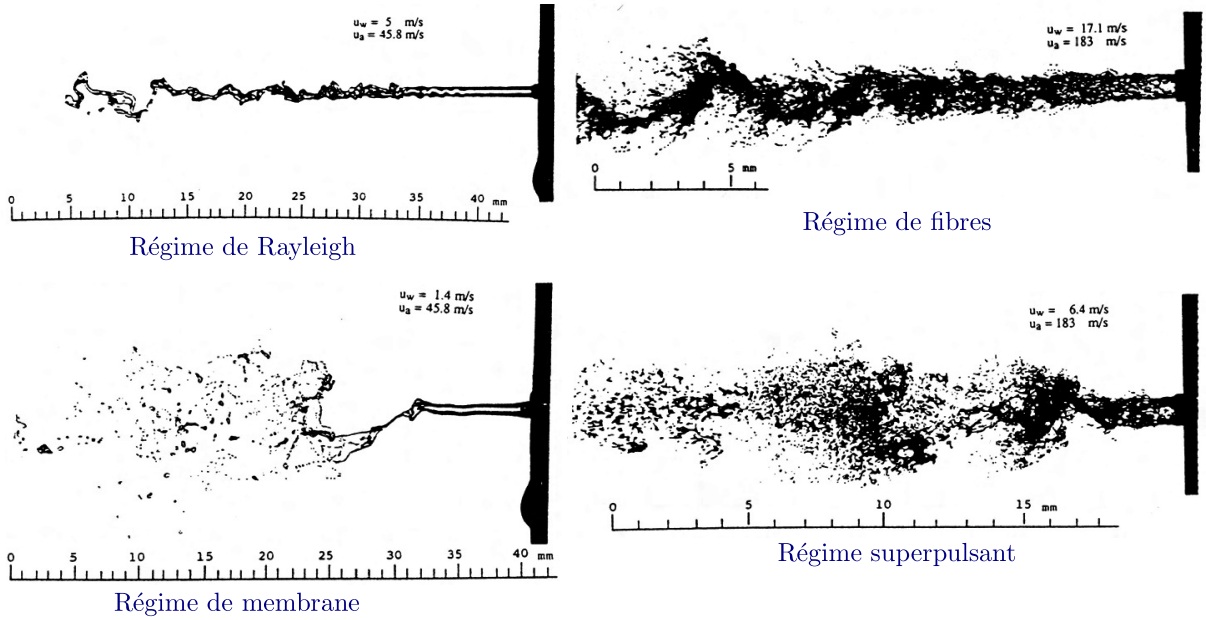


FIGURE 2.4 – ***Classification morphologique de l'atomisation aérodynamique d'un jet liquide selon* CHIGIER *et* FARAGO *[43].***

D'autres études expérimentales ont permis d'observer l'existence de ces différents régimes et leurs transitions. La Figure 2.5 reproduit, par exemple, des visualisations obtenues expérimentalement par LASHERAS et al. [165]. Ces auteurs ont étudié le comportement d'un jet d'eau atomisé par un écoulement d'air coaxial, en faisant varier les conditions d'injection. Sur les images (a,b,c,d), la vitesse du jet d'eau est ainsi de $U_l = 0,33$ m/s ($\mathrm{Re}_l = 1250$), tandis que la vitesse à l'injection de l'écoulement d'air varie entre $15,7 \leq U_g \leq 40,6$ m/s, ce qui correspond à un nombre de Reynolds gazeux $850 \leq \mathrm{Re}_g \leq 2100$, un nombre de Weber aérodynamique $16 \leq \mathrm{We} \leq 110$, et un rapport des flux de quantité de mouvement $3 \leq \mathrm{J} \leq 25$. Sur les figures (e,f,g,h), la vitesse du jet d'eau est réglée à $U_l = 0,58$ m/s ($\mathrm{Re}_l = 2230$), et la vitesse de l'air varie entre $21,7 \leq U_g \leq 85,4$ m/s, correspondant à $1120 \leq \mathrm{Re}_g \leq 4420$, $31 \leq \mathrm{We} \leq 489$ et $2.05 \leq \mathrm{J} \leq 31$.

Plusieurs travaux se sont attachés à délimiter les différents régimes d'atomisation introduits précédemment, en fonction de nombres adimensionnels pertinents. Comme le soulignent MEYERS [194] et LEROUX et al. [175], les critères retenus diffèrent parfois selon les auteurs. Alors que CHIGIER et FARAGO [43] ont d'abord délimité les

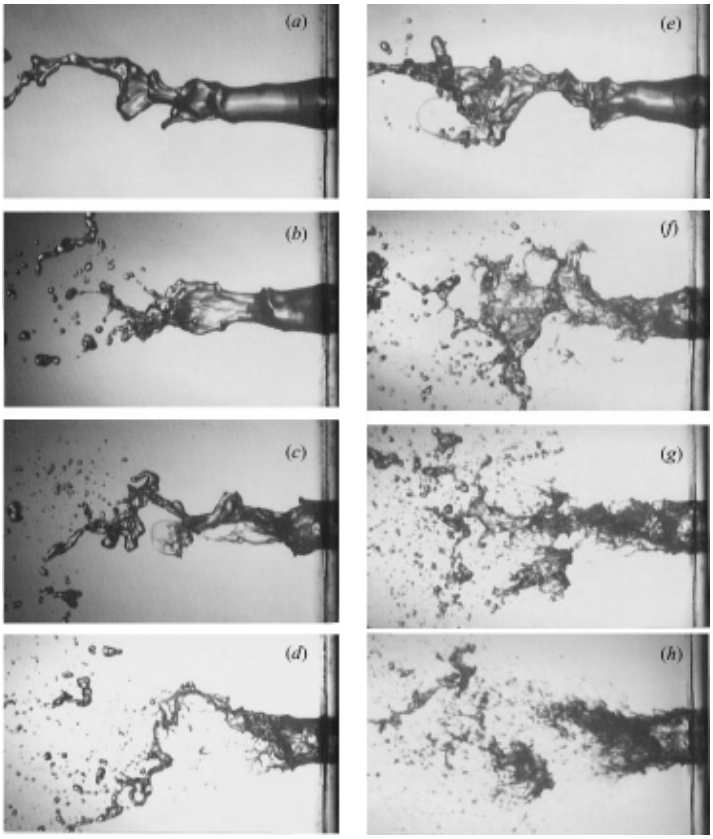


FIGURE 2.5 – ***Visualisations expérimentales de l'atomisation d'un jet d'eau par un écoulement d'air co-axial pour différentes conditions d'injection. Images issues de* LASHERAS *et al. [165].***

différents régimes en fonction des nombres Re_l et We, LASHERAS et HOPFINGER [164] ont privilégié le nombre J en tant que critère déterminant. LEROUX et al. [175] unifient les deux visions en remarquant la relation qui existe entre ces nombres. En effet, nous avons formellement (voir la définition des nombres adimensionnels en § 2.1) :

$$\mathrm{Re}_l\,\mathrm{Oh}_l\sqrt{\frac{\mathrm{J}}{\mathrm{We}}}\left(1-\frac{U_l}{U_g}\right)=1\,. \tag{2.10}$$

Le terme $\left(1-U_l/U_g\right)$ est négligeable puisque le gaz est généralement bien plus rapide que le liquide. Par conséquent, les deux visions ne sont pas contradictoires. Lorsque CHIGIER et FARAGO [43] observent l'apparition du régime superpulsant pour $\mathrm{Re}_l\mathrm{We}^{-1/2} < 100$, avec un nombre d'Ohnesorge liquide sous-jacent qui est constant et vaut $\mathrm{Oh}_l = 2\cdot 10^{-3}$, ce critère de transition est en fait équivalent à $\mathrm{J} > 25$, en cohérence avec les résultats de HOPFINGER et LASHERAS [140]. En d'autres termes, pour un nombre d'Ohnesorge fixé, la donnée du nombre J est équivalente à la connaissance du couple $(\mathrm{Re}_l, \mathrm{We})$ et inversement.

LEROUX et al. [175] concluent finalement que le couple $(\mathrm{J}, \mathrm{Re}_g)$ est le jeu de nombres adimensionnels le plus pertinent, et proposent donc une classification des régimes d'atomisation primaire des jets assistés dans l'espace $(\mathrm{J}, \mathrm{Re}_g)$. Pour cela, ils réalisent plusieurs expériences d'injection coaxiale en faisant varier la géométrie de l'injecteur, la nature des fluides et les conditions d'injection. Ils identifient le régime qui correspond à chaque point de fonctionnement, reportent leurs résultats dans le plan $(\mathrm{J}, \mathrm{Re}_g)$, et reproduisent en outre sur ce diagramme les résultats obtenus précédemment par CHIGIER et FARAGO [43] et HOPFINGER et LASHERAS [140]. Le diagramme qu'ils obtiennent est reproduit ici sur la Figure 2.6. A partir de ces résultats, ils font la synthèse suivante :

- Le régime superpulsant est observé pour des valeurs de $\mathrm{J} > \mathrm{J}_{sp}$, où le seuil de transition J_{sp} dépend du nombre Re_g selon la relation $\mathrm{J}_{sp} = 2.\,10^5\,\mathrm{Re}_g^{-1,1}$.
- Le régime de Rayleigh est observé pour des valeurs de $\mathrm{J} < \mathrm{J}_r$, et le seuil de transition J_r dépend également du nombre Re_g, cette fois selon la relation $\mathrm{J}_r = 7.\,10^6\,\mathrm{Re}_g^{-1,9}$.
- Dans la zone intermédiaire, c'est-à-dire pour $\mathrm{J}_r < \mathrm{J} < \mathrm{J}_{sp}$, les régimes de fibres et de membrane peuvent être rencontrés. La distinction entre ces deux régimes n'est pas claire dans cette zone. LEROUX et al. [175] indiquent que le régime de fibres semble privilégié lorsque la turbulence du liquide est forte, ce qui favorise la création des ligaments.

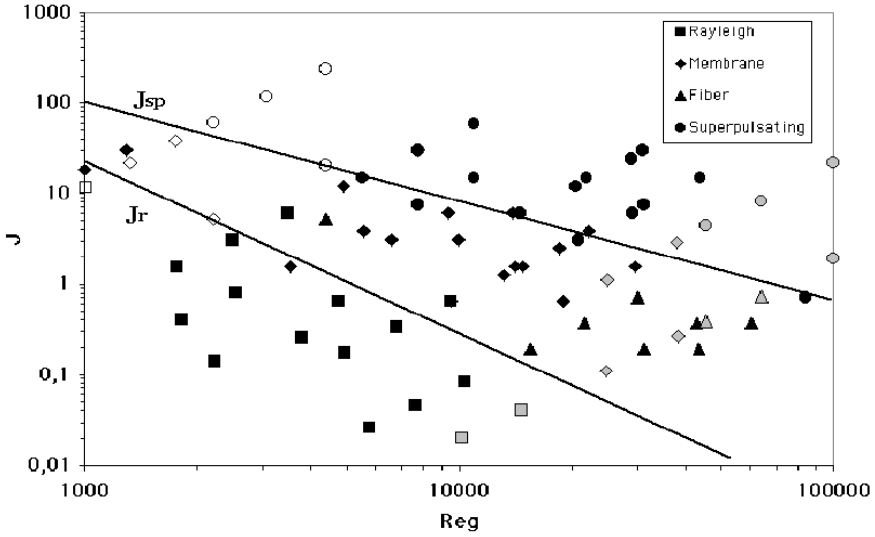


FIGURE 2.6 – *Classification des régimes d'atomisation de jets coaxiaux en fonction de J et de Re_g, d'après* LEROUX *et al. [175]. Symboles noirs : résultats expérimentaux de* LEROUX *et al. [175]. Symboles gris : résultats expérimentaux de* CHIGIER *et* FARAGO *[43]. Symboles blancs : résultats expérimentaux de* HOPFINGER *et* LASHERAS *[140].*

2.3.2 Description des mécanismes physiques

De la même manière que pour l'atomisation mécanique, la rupture d'un jet liquide assisté est due à des instabilités qui naissent à l'interface entre le liquide et le gaz. Ces instabilités sont des perturbations périodiques qui développent des longueurs d'onde préférentielles, amplifiées jusqu'à la rupture du jet. Les travaux de MARMOTTANT et VILLERMAUX [186] établissent un scénario, selon lequel le développement des instabilités s'effectue en plusieurs étapes (cf. Figure 2.7) :

(i) Dans un premier temps, une instabilité interfaciale axisymétrique de type Kelvin-Helmholtz s'établit dans la direction longitudinale du jet, avec une longueur d'onde λ.

(ii) Dans un second temps, des instabilités transverses de type Rayleigh-Taylor apparaissent, causées par le passage de l'ondulation longitudinale. Elles déstabilisent le jet liquide dans la direction perpendiculaire à son axe d'écoulement. La longueur d'onde la plus amplifiée de ces instabilités transverses est notée $\lambda_\perp$.

(iii) Finalement, les instabilités transverses sont à l'origine de la formation de ligaments, lesquels sont ensuite accélérés par l'écoulement gazeux, étirés et enfin arrachés du jet liquide.

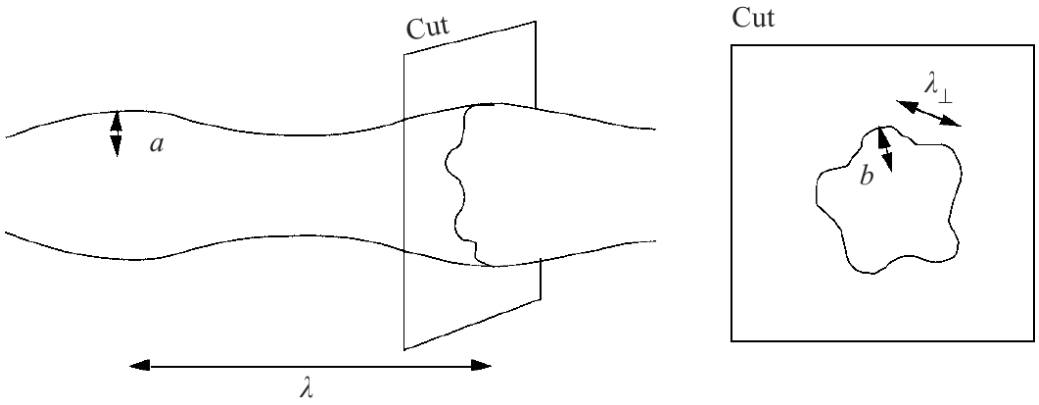


FIGURE 2.7 – *Développement de l'instabilité transverse en superposition de l'instabilité longitudinale selon* MARMOTTANT *et* VILLERMAUX *[186].*

Une analyse théorique détaillée de ce scénario est également proposée par MARMOTTANT et VILLERMAUX [186].

Analyse de l'instabilité longitudinale de cisaillement

L'analyse théorique de l'instabilité des jets liquides dépend en premier lieu de l'hypothèse faite concernant la

forme des profils de vitesse de part et d'autre de l'interface. Deux cas limites peuvent être considérés, comme le montre la Figure 2.8. Les profils de vitesse peuvent être supposés discontinus (limite de Kelvin-Helmholtz [4]), ce qui revient à supposer des épaisseurs de vorticité infiniment minces. A l'opposé, les profils de vitesses peut être supposés continus au niveau de l'interface (limite de Rayleigh), auquel cas la couche de vorticité dans le gaz a une épaisseur non-nulle δ [5].

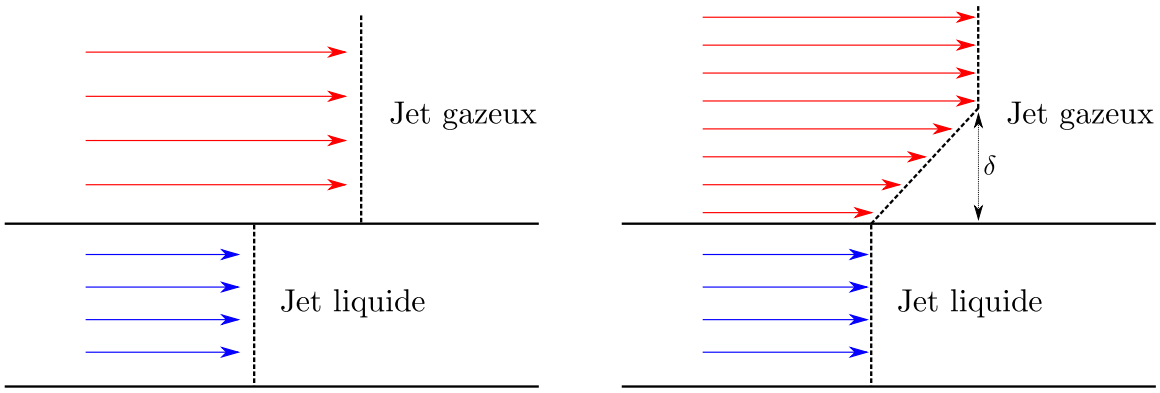


FIGURE 2.8 – ***Profil de vitesse discontinu (analyse de stabilité de Kelvin-Helmholtz) et continu (analyse de stabilité de Rayleigh).***

L'hypothèse d'un profil discontinu a longtemps été à la base de toutes les analyses de stabilité linéaire. C'est par exemple l'hypothèse faite par REITZ [225] pour décrire l'atomisation des jets libres (cf. § 2.2). Elle était alors justifiée par l'hypothèse de fluides parfaits. Cependant, dans le cas des jets assistés, MARMOTTANT et VILLERMAUX [186] ont montré que la couche de cisaillement dans le gaz peut avoir une influence décisive. Dans ce cas, il serait plus réaliste de suivre l'hypothèse de Rayleigh concernant la forme des profils de vitesse. Pour trancher la question, MARMOTTANT et VILLERMAUX [186] écrivent une analyse de stabilité pour chacune des deux hypothèses : établissement de l'équation de dispersion, calcul de la longueur d'onde la plus amplifiée et de son taux de croissance. Ils montrent alors que la validité respective des deux approches est fonction du nombre de Weber. Ainsi, l'analyse de Kelvin-Helmholtz convient bien au cas limite $\mathrm{We} \ll 1$ (prépondérance de la tension de surface dans le mécanisme de croissance de l'instabilité longitudinale), tandis que l'analyse de Rayleigh est mieux adaptée au cas limite opposé $\mathrm{We} \gg 1$ (prépondérance des effets aérodynamiques par rapport aux effets de tension de surface). Ils montrent aussi que la transition entre les domaines de validité des deux descriptions s'opère pour un nombre de Weber de l'ordre de

$$\mathrm{We} \approx \sqrt{\rho_g/\rho_l}\,. \tag{2.11}$$

Par conséquent, puisque les nombres de Weber rencontrés en pratique dans les injecteurs coaxiaux sont généralement très supérieurs à $\sqrt{\rho_g/\rho_l}$, il s'ensuit naturellement que l'analyse de Rayleigh est la plus adaptée. Ceci tend à montrer que le processus d'atomisation coaxiale est principalement piloté par des effets aérodynamiques, justifiant *a posteriori* la dénomination "d'atomisation aérodynamique". C'est d'ailleurs ce que confirment les résultats expérimentaux de LEROUX et al. [175], même si MARMOTTANT et VILLERMAUX [186] précisent que la concordance des résultats expérimentaux avec les résultats analytiques n'est vérifiée qu'en termes de "tendances". Les évolutions de la longueur d'onde privilégiée λ et de son taux de croissance $\omega_i(\lambda)$, grandeurs exprimées par les relations

$$\lambda \approx \delta\sqrt{\rho_l/\rho_g}, \quad \omega_i(\lambda) \approx \frac{\rho_g}{\rho_l}\frac{U_g}{\delta}\,, \tag{2.12}$$

sont ainsi bien estimées. Mais les valeurs numériques obtenues ne correspondent pas précisément aux valeurs expérimentales. Ceci s'explique par l'hypothèse d'un profil de vitesse linéaire par morceaux dans le gaz, qui reste une approximation. En réalité le profil de vitesse a davantage une forme parabolique.

Analyse des instabilités transverses

La naissance des instabilités transverses s'explique par l'accélération subie par l'interface liquide-gaz lors du passage de l'ondulation longitudinale. En effet, l'accélération de l'interface présente un caractère oscillatoire, alternativement orientée vers le gaz puis vers le liquide. Or, l'accélération est instable lorsqu'elle est orientée vers la phase la plus lourde, c'est précisément le mécanisme de l'instabilité de Rayleigh-Taylor. A partir des

4. A ne pas confondre avec l'instabilité de Kelvin-Helmholtz, qui décrit un mécanisme physique particulier.
5. Notons qu'il existe également en toute rigueur une épaisseur de vorticité dans le liquide, cependant elle peut être négligée devant celle du gaz (MARMOTTANT et VILLERMAUX [186]).

expressions connues de la longueur d'onde et du taux de croissance de l'instabilité de Rayleigh-Taylor (voir par exemple CHANDRASEKHAR [37]), MARMOTTANT et VILLERMAUX [186] parviennent à établir la condition pour que les instabilités transverses se développent, et conduisent ensuite à la formation des ligaments. Cette condition porte sur les caractéristiques de ***l'instabilité longitudinale***. Précisément, l'amplitude a de cette dernière (cf. Figure 2.7) doit être supérieure à l'amplitude critique $a_c \approx 0,5\,\lambda \mathrm{We}_\lambda^{-1/3}$, où $\mathrm{We}_\lambda = \rho_g U_g^2 \lambda/\sigma_l$ est le nombre de Weber construit sur sa longueur d'onde λ. La longueur d'onde la plus amplifiée de l'instabilité transverse, à savoir $\lambda_\perp$, dépend alors de λ selon la relation

$$\lambda_\perp \propto \lambda\, \mathrm{We}_\lambda^{-1/3}\,. \tag{2.13}$$

Finalement, en remplaçant dans la relation précédente l'expression trouvée pour λ en (2.12), MARMOTTANT et VILLERMAUX [186] obtiennent

$$\lambda_\perp = C_\perp \delta\, \mathrm{We}_\delta^{-1/3} \left(\frac{\rho_g}{\rho_l}\right)^{-1/3}\,, \tag{2.14}$$

où $\mathrm{We}_\delta = \left(\rho_g U_g^2 \delta\right)/\sigma_l$ est le nombre de Weber basé sur l'épaisseur de vorticité dans le gaz, et $C_\perp \approx 2,8$ est une constante. On note que la longueur d'onde $\lambda_\perp$ dépend de la tension de surface, alors que ce n'est pas le cas pour la longueur d'onde de l'instabilité longitudinale (voir la relation (2.12)).

Création, élongation et rupture des ligaments

La validité des analyses précédentes est limitée aux ondulations de faibles amplitudes, puisqu'elles s'appuient sur des résultats de l'analyse de stabilité ***linéaire***. C'est pourquoi, lorsque l'amplitude des oscillations transverses devient importante, la dynamique des ligaments qui se forment et sont accélérés par l'écoulement gazeux, doit être reformulée. Pour cela, MARMOTTANT et VILLERMAUX [186] considèrent qu'un ligament s'étire en conservant un volume v_0 constant. Ce volume de liquide qui va constituer le ligament est défini initialement comme celui d'une sphère fictive de diamètre d_0, où d_0 est relié à la longueur d'onde de l'instabilité transverse selon la relation :

$$d_0 \approx 0,23\lambda_\perp\,. \tag{2.15}$$

En appliquant le principe fondamental de la dynamique à un ligament, en considérant que les forces qui lui sont appliquées se limitent à la force de traînée et aux tensions capillaires, MARMOTTANT et VILLERMAUX [186] établissent l'expression des temps caractéristiques d'accélération t_a et de rupture t_b du ligament, ainsi que celles de sa longueur ζ_b et de son épaisseur ξ_b à la rupture :

$$t_a \approx \frac{d_0}{U_g}\sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}}, \quad t_b \approx t_\sigma, \quad \zeta_b \approx d_0\,(t_\sigma/t_a)^2\,, \quad \xi_b \approx d_0\,(t_\sigma/t_a)^{-1}\,. \tag{2.16}$$

Dans la relation précédente, $t_\sigma \approx \sqrt{\rho_l \lambda_\perp^3/\sigma_l}$ représente le temps capillaire du ligament. Nous verrons en § 2.3.3 que MARMOTTANT et VILLERMAUX [186] déduisent la forme de la distribution en taille des gouttes du spray à partir des expressions établies ci-dessus.

2.3.3 Corrélations utiles

Longueur de liquide intact

La longueur de liquide intact est une notion potentiellement ambigüe. A titre d'exemple, nous avons vu en § 2.2 que REITZ et BRACCO [227] distinguent deux types de longueur pour caractériser les jets libres. La ***longueur de surface intacte*** désigne la distance depuis la sortie de l'injecteur à partir de laquelle on rencontre les ***premières*** structures liquides complètement détachées du jet principal, alors que la ***longueur de cœur intact*** désigne la distance depuis la sortie de l'injecteur à partir de laquelle ***toutes*** les structures liquides que l'on trouve dans le plan transverse sont détachées du jet originel. La définition très largement retenue par les auteurs qui ont proposé des corrélations pour la longueur de liquide intact des jets assistés est celle de la ***longueur de cœur intact***, que l'on notera L_b. Les premières corrélations proposées dans la littérature exprimaient L_b comme une fonction des nombres We et Re_l. C'est le cas par exemple de la relation proposée par EROGLU et al. [89] [6] :

$$\frac{L_b}{D_l} = 0,66\mathrm{We}^{-0,4}\mathrm{Re}_l^{0,6}\,. \tag{2.17}$$

6. Le coefficient multiplicateur dans la corrélation de EROGLU et al. [89] n'est pas 0,66 mais 0,5, en raison d'une définition différente du nombre de Weber, basé sur le rayon de l'injecteur liquide et non sur son diamètre.

D'autres auteurs ont par la suite proposé des corrélations en fonction du nombre J. On trouve par exemple dans plusieurs travaux (VILLERMAUX [285], ENGELBERT et al. [88], REHAB et al. [224]) l'expression

$$\frac{L_b}{D_l} = \frac{6}{\sqrt{\mathrm{J}}} \,. \tag{2.18}$$

Plus récemment, LEROUX et al. [175] ont proposé :

$$\frac{L_b}{D_l} = \frac{10}{\mathrm{J}^{0,3}} \,. \tag{2.19}$$

Par ailleurs, il est intéressant de noter que l'on peut retrouver la relation (2.18) en utilisant l'analyse de stabilité théorique. En effet, celle-ci relie la longueur de rupture du jet liquide à la longueur d'onde de l'instabilité longitudinale et à son taux de croissance selon la formulation suivante (CARÉ et LEDOUX [35]) :

$$\frac{L_b}{D_l} \propto \frac{U_l}{\lambda\, \omega_i} \,. \tag{2.20}$$

En utilisant l'expression (2.12) donnant λ et ω_i, et d'après la définition de J écrite en (2.1), la relation précédente devient effectivement :

$$\frac{L_b}{D_l} \propto \frac{1}{\sqrt{J}} \,. \tag{2.21}$$

Angle d'ouverture du spray

L'angle d'ouverture du spray est un paramètre important pour caractériser le comportement d'un injecteur réel, puisqu'il contrôle l'angle d'ouverture de la flamme. A partir de données expérimentales, LEROUX et al. [175] ont établi des corrélations donnant l'angle moyen d'ouverture du spray θ en fonction des conditions d'injection. Ils notent qu'une distinction doit être faite suivant les régimes d'atomisation. Dans les régimes de ***membrane*** et de ***fibres***, ils établissent une relation selon laquelle l'angle moyen d'ouverture dépend du nombre J comme

$$\tan\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{\mathrm{J}^{0,3}}{3} \,. \tag{2.22}$$

Dans le régime ***superpulsant***, en revanche, il est plus difficile de définir un angle moyen de spray. Ils parviennent tout de même à dégager une tendance, selon laquelle l'angle d'ouverture du spray ne dépend pas de la vitesse d'injection du liquide et décroit quand la vitesse d'injection du gaz augmente.

En outre, LEROUX et al. [175] confrontent leurs résultats expérimentaux aux prédictions fournies par les différentes analyses de stabilité théoriques. Pour cela, ils établissent les deux relations analytiques qui donnent l'angle du spray θ en fonction de J, suivant que l'on suit l'hypothèse de Kelvin-Helmholtz ou bien l'hypothèse de Rayleigh concernant la forme du profil de vitesse. Ils obtiennent ainsi l'expression de deux fonctions θ_{KH}(J) et θ_R(J) qu'ils tracent pour différentes valeurs de J, correspondant principalement au régime de fibres et au régime superpulsant. Il s'avère que les prédictions de l'analyse de Rayleigh concordent assez bien avec les résultats expérimentaux, bien mieux du moins que les prédictions de l'analyse de Kelvin-Helmholtz, en accord avec les conclusions de MARMOTTANT et VILLERMAUX [186].

Distribution en taille et vitesse des gouttes après l'atomisation primaire

Il est intéressant de disposer d'informations sur les propriétés moyennes des gouttes créées à l'issue de l'atomisation primaire, en fonction des conditions d'injection. Ceci vaut pour leur diamètre mais également pour leur vitesse. Ces informations peuvent en effet être utilisées pour le développement de modèles numériques. Pour cela, nous nous référons encore une fois aux travaux de MARMOTTANT et VILLERMAUX [186] (voir également VILLERMAUX [283] et VILLERMAUX et BOSSA [286]). Nous avons vu dans les sections précédentes que ces auteurs ont développé une analyse théorique qui leur a permis d'établir des relations pour la longueur d'onde $\lambda_\perp$ des instabilités transverses, puis pour la taille des ligaments. En poursuivant l'analyse, ils en déduisent la taille moyenne des gouttes créées par la rupture des ligaments, c'est-à-dire la taille des gouttes immédiatement issues de l'atomisation primaire. Cette taille moyenne, notée $\langle d \rangle$, s'exprime :

$$\langle d \rangle \approx 0,4 d_0 \approx 0,1 \lambda_\perp \,, \tag{2.23}$$

où l'on rappelle que d_0 désigne le diamètre d'une sphère fictive qui comprend le même volume de liquide que le ligament qui se brise. Les expressions de d_0 et $\lambda_\perp$ ont été données en (2.15) et (2.14).

Toutefois, l'instabilité et la rupture des ligaments est un phénomène chaotique qui génère de la ***polydispersion*** lors de la formation du spray. Les analyses de stabilité s'attachent à dégager des ***tendances***, et à ce titre elles fournissent des relations (temps caractéristiques, tailles des ligaments) qui ne donnent qu'une information ***moyenne***. Dans la réalité, toutes les observations révèlent que les gouttes du spray sont assez largement distribuées, en taille comme en vitesse. Pour cette raison, MARMOTTANT et VILLERMAUX [186] se sont attachés à établir mieux qu'une simple valeur moyenne pour le diamètre des gouttes créées. Ils ont prédit la distribution en taille des gouttes issues de l'atomisation primaire. Pour cela, ils procèdent en deux étapes. Tout d'abord, ils établissent la fonction densité de probabilité $p_B(d/d_0)$ qui définit la distribution en taille des gouttes issues d'un ***ligament de taille fixe*** $d_0 \propto \lambda_\perp$. Il s'avère que $p_B(d/d_0)$ est bien approchée par une distribution Gamma du type

$$p_B(d/d_0) = \frac{n^n}{\Gamma(n)} (d/d_0)^{n-1} \, \mathrm{e}^{-nd/d_0} \, . \tag{2.24}$$

Or, la taille d_0 des ligaments est également distribuée, même si cette distribution $p_L(d_0)$ est plus étroite. La distribution globale des diamètres du spray après l'atomisation primaire est alors obtenue par convolution des deux distributions $p_B(d/d_0)$ et $p_L(d_0)$. Si l'on note $x = d/\langle d \rangle$, la distribution normalisée globale s'exprime

$$p(x) = \frac{1}{\alpha} \, \mathrm{e}^{-\alpha x} \, . \tag{2.25}$$

Le facteur pré-exponentiel α dépend alors de la valeur de n dans la distribution p_B, ainsi que de la relation (2.23) entre la taille moyenne des gouttes $\langle d \rangle$ et d_0 :

$$\alpha = n \frac{\langle d \rangle}{d_0} \, . \tag{2.26}$$

D'après VILLERMAUX et al. [284] et MARMOTTANT et VILLERMAUX [186], la valeur moyenne de n se situe aux alentours de $n \approx 3,5$. Dans ce cas, nous obtenons pour α :

$$\alpha \approx 1,4 \, . \tag{2.27}$$

Une fois que nous disposons d'une distribution pour les diamètres des gouttes, il est possible d'en déduire une distribution pour leurs vitesses. Cette approche a été suivie dans un rapport non publié de Villermaux, s'inspirant de travaux sur la chute des gouttes de pluie sous l'effet de la gravité (VILLERMAUX et ELOI [287]). En effet, les ligaments sont accélérés sous l'effet du cisaillement gazeux, si bien qu'au moment où ils se brisent, les gouttes formées possèdent une vitesse intermédiaire entre la vitesse du jet liquide et celle du gaz. Précisément, leur direction est principalement celle du gaz environnant, tandis que la norme de la vitesse est encore bien inférieure à celle du gaz, la valeur exacte étant pilotée par la force de traînée. Villermaux établit ainsi la forme suivante pour la distribution de la norme v des vitesses :

$$q(v) = \frac{1}{6v} \left(\beta \frac{U_g}{v} \right)^4 \mathrm{e}^{-\beta \frac{U_g}{v}}, \quad \beta = \frac{C_D}{4} \sqrt{\frac{\rho_g}{\rho_l}} \, . \tag{2.28}$$

Dans cette relation, C_D désigne le coefficient de traînée de la goutte, dont on pourra trouver les expressions classiques en § 7.1. Sur le même principe, il est également possible d'estimer la vitesse moyenne $\langle v \rangle$ qui correspond au diamètre moyen $\langle d \rangle$:

$$\langle v \rangle \approx C_D U_g \frac{d_0}{\langle d \rangle} \sqrt{\frac{\rho_g}{\rho_l}} \approx 2,5 C_D U_g \sqrt{\frac{\rho_g}{\rho_l}} \, . \tag{2.29}$$

2.3.4 Caractérisation de la configuration Mascotte

Nous allons chercher ici à caractériser le point de fonctionnement A-10 du banc Mascotte, présenté en § 1.3.1, et dont on rappelle qu'il constitue l'objectif d'application de cette étude. Il s'agit d'évaluer certaines des grandeurs typiques de l'atomisation primaire introduites dans les sections précédentes. Nous avons besoin pour cela de la valeur de quelques nombres caractéristiques, dont certains ont déjà été calculés dans le Tableau 1.2 du Chapitre 1.

Régime d'atomisation

Pour commencer, déterminons le ***régime d'atomisation*** en utilisant le diagramme de LEROUX et al. [175], reproduit sur la Figure 2.6. Les valeurs J = 13,7 et $\mathrm{Re}_g \approx 10^5$ reportées dans le Tableau 1.2 indiquent assez clairement une tendance au ***régime superpulsant***. Il faut cependant être assez prudent sur ce point. En effet, la corrélation de LEROUX et al. [175] n'a pas été établie à partir d'expériences en conditions réactives, comme c'est le cas de Mascotte. Ceci constitue une différence importante dans la mesure où les propriétés de la phase gazeuse en conditions réactives sont très fortement variables. La flamme s'établit à proximité immédiate du front d'atomisation, aussi la composition et la température de la phase gazeuse peuvent évoluer de façon importante à mesure que l'on s'éloigne

de la sortie de l'injecteur. Si la vitesse de l'écoulement gazeux conserve le même ordre de grandeur, en revanche sa masse volumique et sa viscosité peuvent varier. Par conséquent, il en est de même pour les nombres J et Re_g, ainsi que pour le régime d'atomisation. Typiquement, les gaz chauds produits par la combustion oxygène-hydrogène peuvent être à la fois moins denses et plus visqueux que l'hydrogène froid qui est injecté. Ceci a pour effet de diminuer à la fois les nombres J et Re_g, il est donc assez probable que l'on se trouve plutôt à la limite du régime de fibres.

Longueur de cœur liquide

L'injecteur liquide dans Mascotte a un diamètre $D_l = 5$ mm, et nous avons d'après le Tableau 1.2 $\mathrm{We} \approx 2,5.10^4$, $\mathrm{Re}_l \approx 5,6.10^4$ et $\mathrm{J} = 13,7$. Les corrélations (2.17), (2.18) et (2.19) donnent des valeurs assez différentes, respectivement

$$L_b \approx 41 \text{ mm}\,, \tag{2.30}$$

$$L_b \approx 8 \text{ mm}\,, \tag{2.31}$$

$$L_b \approx 23 \text{ mm}\,. \tag{2.32}$$

Distributions en taille et vitesse des gouttes après l'atomisation primaire

Nous pouvons ici faire la même remarque que précédemment : du fait des fortes variations au sein de la phase gazeuse en conditions réactives, il parait difficile d'appliquer les relations établies en § 2.3.3 sans en questionner la fiabilité. En effet, il s'avère que l'on obtient une valeur moyenne $\langle d \rangle$ et par suite une distribution assez radicalement différentes selon les conditions que l'on suppose pour la phase gazeuse. Commençons par faire un premier calcul, en utilisant strictement les propriétés de l'hydrogène froid injecté, c'est-à-dire les données du Tableau 1.2. Il nous faut d'abord calculer l'épaisseur de vorticité δ. L'épaisseur de vorticité s'exprime en fonction du nombre de Reynolds gazeux (SCHLICHTING [244]) :

$$\delta \approx D_g \frac{\mathrm{Re}_g^{-3/4}}{0,022}\,. \tag{2.33}$$

En utilisant la valeur $\mathrm{Re}_g \approx 9,6.10^4$ fournie par le Tableau 1.2, il vient :

$$\delta \approx 27 \text{ µm}\,. \tag{2.34}$$

Nous obtenons ensuite :

$$\mathrm{We}_\delta = \left(\rho_g U_g^2 \delta\right)/\sigma_l \approx 139\,, \tag{2.35}$$

puis

$$\lambda_\perp \approx 2,8\delta\,\mathrm{We}_\delta^{-1/3}\left(\frac{\rho_g}{\rho_l}\right)^{-1/3} \approx 161 \text{ µm}\,. \tag{2.36}$$

Le diamètre moyen obtenu est finalement :

$$\langle d \rangle \approx 0,1\lambda_\perp \approx 16 \text{ µm}\,. \tag{2.37}$$

Supposons maintenant que les propriétés moyennes de la phase gazeuse qui génère l'atomisation primaire du jet liquide ne sont pas celles de l'hydrogène froid, mais plutôt celles d'un mélange à haute température incluant des produits de combustion, et dont les propriétés moyennes sont les suivantes (unités S.I.) :

$$\rho_g \approx 0,5\,, \quad \mu_g \approx 9,5.10^{-5}\,. \tag{2.38}$$

Ces données sont typiquement celles que l'on mesure pour un mélange constitué de 87% (en masse) de vapeur d'eau, 7% d'hydrogène et 6% d'oxygène gazeux, sous une pression de 10,7 bar et une température de 3000 K. Avec ces valeurs, le calcul de la taille moyenne des gouttes atomisées donne :

$$\mathrm{Re}_g \approx 2940 \;\Rightarrow\; \delta \approx 360 \text{ µm} \;\Rightarrow\; \mathrm{We}_\delta \approx 380 \;\Rightarrow\; \lambda_\perp \approx 2 \text{ mm} \;\Rightarrow\; \langle d \rangle \approx 200 \text{ µm}\,. \tag{2.39}$$

Il y a donc plus d'un ordre de grandeur entre les deux estimations. En outre, une autre incertitude importante s'ajoute à cela. Il s'agit de la valeur exacte de la tension de surface σ_l. En effet, le peu d'information disponible ne fournit la tension de surface que pour de l'oxygène liquide à la saturation, c'est-à-dire en équilibre avec sa vapeur. Nous n'avons pas d'information pour l'oxygène liquide en contact avec de l'hydrogène ou en contact avec un mélange gazeux aux propriétés variables. Or, la valeur de la tension superficielle a une influence de premier ordre dans les corrélations, via les différents nombres de Weber.

En ce qui concerne la vitesse des gouttes issues de l'atomisation primaire, d'après la valeur classique pour une sphère dans un écoulement turbulent $C_D \approx 0,438$, et avec $U_g \approx 300$, la relation (2.29) fournit l'ordre de grandeur suivant :

$$\langle v \rangle \approx 10 \text{ m/s}\,. \tag{2.40}$$

Chapitre 3

Revue bibliographique sur la modélisation numérique des écoulements diphasiques atomisants

Après avoir mis en évidence au Chapitre 1 l'intérêt de la simulation numérique pour étudier les phénomènes en aval des injecteurs cryotechniques, proposé au Chapitre 2 une revue sur la théorie physique de l'atomisation primaire des jets liquides, ce chapitre vise à présenter une synthèse bibliographique des approches utilisées pour la simulation numérique des écoulements diphasiques "atomisants". L'objectif est de situer précisément le contexte et les origines de la stratégie que nous adopterons dans la Partie II de ce manuscrit. Cette synthèse n'est pas exhaustive, et nous insistons notamment davantage sur les modèles du type de ceux que nous allons utiliser, en l'occurrence les modèles à interface diffuse et les modèles cinétiques eulériens.

Sommaire

3.1 Classification des approches numériques 39
3.2 Modèles intégrant la reconstruction de l'interface 41
3.2.1 Méthodes eulériennes à capture d'interface 41
3.2.2 Traitement des discontinuités et des relations de saut 42
3.2.3 Lien avec la modélisation de la turbulence 42
3.3 Modèles à interface diffuse 43
3.3.1 Etablissement du modèle général homogénéisé 44
3.3.2 Relaxation du modèle général vers des modèles simplifiés 49
3.3.3 Equation de transport pour la densité d'aire interfaciale 50
3.4 Modèles cinétiques pour la phase dispersée 54
3.4.1 L'équation cinétique de Williams-Boltzmann 55
3.4.2 Les différentes approches pour la résolution de l'équation cinétique 56
3.4.3 Présentation détaillée des méthodes eulériennes 58
3.5 Couplage entre modèles à "phases séparées" et à "phase dispersée" 69

3.1 Classification des approches numériques

La modélisation et la simulation numérique des écoulements diphasiques, voire multiphasiques, est un vaste sujet qui intéresse un grand nombre de domaines : la météorologie, la thermohydraulique nucléaire, les industries automobile, aéronautique et aérospatiale, entre autres. La notion même d'écoulement multiphasique peut désigner des configurations très différentes, selon la nature des phases en présence, leur topologie et leurs interactions. La littérature consacrée à la simulation numérique des écoulements multiphasiques est donc très fournie, et il ne s'agit pas d'en donner ici une description exhaustive. C'est pourquoi nous restreindrons la description aux modèles qui ont été développés pour décrire l'atomisation primaire des jets liquides en présence d'un écoulement gazeux. Dans ce contexte, les difficultés principales pour la simulation numérique proviennent :

- du caractère ***fortement multi-échelles*** du problème (voir la Figure 1.10 au Chapitre 1). La phase liquide se trouve d'abord sous une forme dense, continue, dans une zone où l'écoulement est dit ***à phases séparées***. Puis, sous l'effet du cisaillement opéré par le jet gazeux co-courant, des structures liquides indépendantes du jet principal sont formées et dispersées. Elles présentent alors une topologie variable, prenant la forme de ligaments, dans une zone où l'on qualifiera l'écoulement de ***mixte***. Puis la taille de ces structures se réduit sous l'effet des fragmentations successives, jusqu'à être inférieure de plusieurs ordres de grandeur au diamètre de l'injecteur. Dans cette zone, l'écoulement diphasique est dit ***à phase dispersée***.
- du caractère ***discontinu*** des variables de l'écoulement. De part et d'autre de l'interface, que l'on peut considérer infiniment mince, la densité (a minima), mais aussi éventuellement la pression, la vitesse et la température subissent des sauts pouvant atteindre plusieurs ordres de grandeur.

Par conséquent, obtenir une méthode à même de décrire toutes les échelles de l'écoulement liquide, tout en traitant de manière robuste et précise les discontinuités du problème, constitue un défi majeur pour la simulation numérique. Les différentes approches proposées dans la littérature ne sont généralement bien adaptées que pour traiter une classe topologique particulière d'écoulement diphasique. Nous faisons ici le choix de classer ces approches de la manière suivante :

(i) Les méthodes dites ***à suivi*** ou ***à capture d'interface*** s'attachent à suivre et reconstruire précisément l'interface à l'intérieur même de chaque cellule du maillage. Elles nécessitent donc des schémas numériques d'ordre élevé et des maillages très fins. A ce titre, et par analogie avec les écoulements monophasiques turbulents, ces méthodes constituent en quelque sorte une approche DNS [1] de l'atomisation. Les méthodes de suivi d'interface permettent une description précise de toutes les zones de l'écoulement diphasique, des "phases séparées" jusqu'à la "phase dispersée", ***à condition de pouvoir en supporter le coût en termes de résolution de maillage***. Ce n'est généralement pas le cas, en dehors d'applications purement académiques nécessitant des ressources de calcul très importantes. Pour des applications plus générales, et avec des moyens de calcul plus limités, ce coût est encore trop élevé pour poursuivre le suivi de l'interface jusqu'aux plus petits éléments de la phase dispersée. Ces méthodes présentent par ailleurs d'autres désavantages (voir le Tableau 3.1).

(ii) Les méthodes ***à interface diffuse*** procèdent différemment. Comme leur nom l'indique, elles s'épargnent le suivi et la reconstruction géométrique précise de l'interface à l'intérieur des cellules du maillage. L'interface est étalée sur plusieurs mailles sous l'effet de la diffusion numérique. Un procédé d'***homogénéisation*** permet d'établir des équation moyennées, où des termes de transfert interfaciaux apparaissent et sont à modéliser. Ces méthodes sont plus simples à mettre en œuvre que les méthodes à suivi d'interface, mais elles sont forcément moins précises. Elles souffrent en outre de défauts liés au mélange artificiel entre les phases généré par la diffusion de l'interface : perte d'information sur la topologie de l'interface et éventuellement sur les déséquilibres (mécanique, dynamique, thermique) entre phases, difficulté à modéliser les échanges interfaciaux, problèmes de robustesse des lois thermodynamiques.

Les méthodes à interface diffuses sont capables a priori de décrire toutes les configurations d'écoulement diphasique : des "phases séparées" à la "phase dispersée" en passant par les zones "mixtes". Cela dit, la transition entre ces différentes topologies est complexe à modéliser dans la mesure où elle résulte d'un changement de la topologie même de l'interface en sous-maille, information qui n'est par définition pas connue *a priori* avec les méthodes à interface diffuse. Par ailleurs, il est certes possible de décrire la zone à "phase dispersée" en faisant l'hypothèse que la phase liquide est sous forme de gouttes, et en ajoutant éventuellement une équation sur la densité en nombre de gouttes. Mais dans ce cas, la description est uniquement ***monodispersée*** (une seule taille moyenne par cellule), alors que dans beaucoup de configurations les sprays sont fortement ***polydispersés***.

(iii) Les méthodes ***statistiques*** ou ***cinétiques*** sont dédiées spécifiquement à la description de la phase dispersée. La topologie de la phase dispersée est bien connue : par définition, elle est composée d'inclusions qui

1. Direct Numerical Simulation. Une présentation des différentes approches numériques de la turbulence est fournie en § 5.4.

peuvent généralement être considérées sphériques et ponctuelles, et dont le taux de présence moyen sur un "grand" volume de contrôle est faible. Cette observation permet d'adopter une approche statistique pour décrire la phase dispersée, abandonnant ainsi la vision de la mécanique des milieux continus et les équations de Navier-Stokes. Au plus haut niveau de précision, cette description repose sur une équation cinétique de type Williams-Boltzmann. Un certain nombre de modèles peuvent être dérivés à partir de l'équation cinétique, en adoptant le point de vue lagrangien ou eulérien. Selon les hypothèses simplificatrices effectuées, un niveau de précision plus ou moins important est conservé : prise en compte ou non de la polydispersion en taille et en vitesse, par exemple. Évidemment, ces méthodes ne sont absolument pas adaptées pour décrire les topologies d'écoulement diphasique à phases séparées ou mixtes. De plus, la phase porteuse (gazeuse) reste décrite par les équations de Navier-Stokes. Le couplage entre phase porteuse et phase dispersée se fait alors généralement uniquement via les termes sources, le volume occupé par la phase dispersée étant supposé négligeable. Par ailleurs, la nature du couplage modélisé entre les phases dépend du taux de présence effectif de la phase dispersée. Lorsque sa fraction volumique est très faible, son influence sur la phase gazeuse peut être supposée négligeable et on parle de ***one-way coupling***. En revanche, pour des fractions volumiques plus élevées, l'influence de la phase dispersée sur la phase porteuse doit être prise en compte ***(two-way coupling)***.

(iv) Enfin, une dernière catégorie pourrait consister à coupler certaines des approches précédentes. Typiquement, il parait attrayant de coupler des méthodes de suivi/capture d'interface ou d'interface diffuse pour décrire les zones à phases séparées et mixtes, à une méthode statistique parfaitement adaptée pour la phase dispersée. C'est précisément la stratégie que nous développerons à partir de la Partie II.

Le Tableau 3.1 résume les champs d'application et les avantages et inconvénients de ces différentes approches numériques.

SUIVI OU CAPTURE DE L'INTERFACE	INTERFACE DIFFUSE	MÉTHODES CINÉTIQUES
EXEMPLES DE MODÈLES		
· Front tracking (suivi lagrangien). · Volume of Fluid (VOF). · Level Set.	· Modèle général homogénéisé à 7 équations. · Modèles relaxés à 6, 5, 4 ou 3 équations.	· Méthodes lagrangiennes. · Méthodes eulériennes.
TOPOLOGIE D'ÉCOULEMENT DIPHASIQUE		
√√ Phases séparées. √ Mixte. × Phase dispersée.	√ Phases séparées. √ Mixte. √ Phase dispersée.	× Phases séparées. × Mixte. √√ Phase dispersée.
POINTS FORTS		
· Grande précision.	· Écoulements compressibles et réactifs. · Extensible à un nombre quelconque de phases.	· Polydispersion du spray en sous-maille.
POINTS FAIBLES		
· Reconstruction de l'interface complexe (3D non structuré). · Conservation de la masse. · Difficultés en compressible. · Limité à deux phases.	· Fermeture des termes interfaciaux. · Robustesse thermodynamique. · Description monodisperse de la phase dispersée.	· Voir le Tableau 3.4.

TABLEAU 3.1 – ***Classification des approches numériques pour décrire les écoulements diphasiques atomisants.***

3.2 Modèles intégrant la reconstruction de l'interface

Deux terminologies différentes sont généralement employées pour désigner les méthodes incluant une reconstruction de l'interface. Les méthodes à ***suivi d'interface*** ou "front tracking" opèrent un suivi lagrangien de marqueurs, c'est-à-dire de points mobiles qui définissent l'interface (TRYGGVASON et al. [270]). Celle-ci peut alors être reconstruite à chaque instant à partir de la position des marqueurs. Ce type d'approche est intéressant mais souffre de plusieurs défauts : difficulté à rendre compte intrinsèquement des phénomènes de coalescence ou fragmentation de l'interface, problèmes inhérents aux méthodes lagrangiennes (redistribution des marqueurs, coût important pour avoir une bonne précision).

Les méthodes à ***capture d'interface*** ou "front capturing" utilisent le point de vue eulérien pour reconstruire l'interface, il s'agit principalement des méthodes Volume of Fluid (VOF) et Level Set. Le principe consiste à résoudre les équations de Navier-Stokes incompressibles pour le fluide diphasique, à opérer d'une manière ou d'une autre une reconstruction géométrique précise de l'interface, et à utiliser des relations de saut pour décrire les discontinuités de certaines variables physiques à l'interface. Il n'y a pas de procédé d'homogénéisation, la position de l'interface doit être déterminée ***même à l'échelle de la maille***. Ces méthodes doivent donc traiter deux problématiques distinctes, abordées successivement dans les paragraphes § 3.2.1 et § 3.2.2 ci-dessous :

(i) comment reconstruire la position et la topologie précise de l'interface.

(ii) comment traiter numériquement la discontinuité des variables et les relations de saut.

3.2.1 Méthodes eulériennes à capture d'interface

La méthode Volume of Fluid (VOF)

La méthode VOF proposée par HIRT et NICHOLS [139] consiste à adjoindre aux équations de Navier-Stokes incompressibles une équation de transport d'un scalaire ϕ représentant la fraction volumique de liquide. Si le volume de référence pour la fraction volumique est une cellule du maillage, alors une valeur $\phi = 1$ ou $\phi = 0$ renseigne sur l'absence de l'interface dans la maille, tandis qu'une valeur $0 < \phi < 1$ indique sa présence. A partir de la connaissance du champ de ce scalaire, il est possible de proposer une reconstruction géométrique de l'interface à l'intérieur de la maille. Plusieurs méthodes ont été proposées pour cela, la plus utilisée étant probablement la méthode PLIC (Piecewise Linear Interface Calculation) de GUEYFFIER et al. [119]. La méthode VOF présente l'avantage de conserver strictement la masse de liquide. En revanche, la reconstruction géométrique de l'interface peut se révéler très complexe (d'autant plus sur des maillages 3D non structurés), donc potentiellement coûteuse et imprécise.

La méthode Level Set

La méthode Level Set (OSHER et SETHIAN [211], OSHER et FEDKIW [210], SETHIAN [245]) utilise une autre fonction scalaire φ, qui représente la distance à l'interface et est définie par exemple de sorte que :

$$\begin{cases} \varphi = 0 & \text{au niveau de l'interface} \\ \varphi > 0 & \text{dans la phase liquide} \\ \varphi < 0 & \text{dans la phase gazeuse} \end{cases} \tag{3.1}$$

Ainsi, les iso-lignes $\varphi = 0$ caractérisent l'interface. Comme pour la méthode VOF, une équation de transport pour φ est ajoutée aux équations de Navier-Stokes incompressibles. Comparée à la méthode VOF, la méthode Level Set fournit davantage d'informations. En effet, en tout point de l'espace, la valeur prise par la fonction φ renseigne sur la distance de la portion d'interface la plus proche, même si elle est éloignée. Ce n'est pas le cas avec la méthode VOF, où l'information est limitée au voisinage immédiat de l'interface. En conséquence, la méthode Level Set permet de calculer plus facilement et plus précisément les caractéristiques géométriques de l'interface, telles que sa normale et sa courbure. En contrepartie, la méthode Level Set classique souffre de problèmes de conservation de la masse, induits par la dissipation des schémas numériques. Elle requiert donc des schémas très précis pour que ces problèmes de perte de masse ne soient pas rédhibitoires. Disposer de schémas numériques très peu dissipatifs est d'ailleurs un objectif et une nécessité partagés par toutes les méthodes qui s'attachent à reconstruire l'interface. A ce titre, il est également possible d'utiliser des méthodes de raffinement automatique de maillage autour de l'interface (VINCENT et CALTAGIRONE [288]), et augmenter ainsi encore davantage la précision.

Extension des méthodes VOF et Level Set

Plusieurs améliorations ont été proposées afin de remédier aux problèmes posés par les méthodes classiques VOF et Level Set. La question de la conservativité de la méthode Level Set a été abordée par OLSSON et KREISS [207]

et OLSSON et al. [208] en changeant la définition de la fonction Level Set. Ces travaux ont été repris et poursuivis par DESJARDINS et al. [62]. Il existe également des approches couplées Level Set/VOF qui retiennent les points forts de chaque méthode : conservativité de la méthode VOF d'une part, précision de la reconstruction géométrique de l'interface avec la méthode Level Set d'autre part. Ces méthodes couplées ont été développées notamment dans les travaux de SUSSMAN et PUCKETT [263], MÉNARD et al. [192] et MÉNARD [191].

3.2.2 Traitement des discontinuités et des relations de saut

Concernant le traitement numérique des discontinuités et des relations de saut, il s'agit principalement de pouvoir gérer le fort rapport des densités de part et d'autre de l'interface, et de rendre compte de la tension de surface. Pour cela, deux approches différentes sont couramment utilisées :

- La méthode CSF (Continuum Surface Force) de BRACKBILL et al. [28] consiste à étaler artificiellement les discontinuités sur une épaisseur de quelques mailles autour de l'interface. De plus, la tension de surface, qui est un phénomène normalement purement surfacique, peut être reformulée sous forme volumique. Ainsi, elle peut être intégrée à l'équation de conservation de la quantité de mouvement sous la forme d'un terme source, ce qui facilite la discrétisation numérique (cf. § 5.1.2).
- La méthode Ghost Fluid a été introduite par FEDKIW et al. [97] afin d'éviter l'épaississement de l'interface. Les variables discontinues à l'interface (densité, pression...) sont prolongées artificiellement, et de manière continue, dans des cellules fantômes ("Ghost Cells"). La discrétisation est alors plus précise que dans la méthode CSF, la connaissance des conditions de saut permettant de retranscrire fidèlement le rapport de densité et la tension de surface.

3.2.3 Lien avec la modélisation de la turbulence

Simulation numérique directe

Dans le domaine des écoulements monophasiques turbulents, la simulation numérique directe (DNS) implique de capter les plus petites structures turbulentes jusqu'à l'échelle de Kolmogorov. De manière analogue, les méthodes à suivi d'interface s'astreignent à capter les plus petites structures liquides jusqu'à l'échelle des gouttes. Le suivi d'interface constitue donc en quelque sorte une approche DNS de l'atomisation. Lorsqu'il s'agit de simuler l'atomisation d'un jet liquide turbulent, en présence d'un écoulement gazeux lui-même turbulent, le maillage utilisé doit donc être extrêmement bien résolu. Si de plus, la configuration simulée implique un processus de combustion et donc l'évaporation de la phase liquide, alors la démarche devient impossible. En effet, la taille des plus petites structures liquides à capter tend vers zéro à mesure que les gouttes s'évaporent.

L'application de cette approche à la simulation complète d'une chambre de combustion est donc inenvisageable. Des simulations de type DNS de l'atomisation de jets liquides turbulents ont bien été réalisées assez récemment (MÉNARD et al. [192], DESJARDINS et al. [62], et SHINJO et UMEMURA [246]) [2], mais ces simulations, en plus d'être extrêmement coûteuses, ne sont pas encore capables de décrire un cas réel complet. Les propriétés physiques des phases liquide et gazeuse doivent être modifiées de manière à réduire artificiellement les nombres de Weber et de Reynolds, et par ricochet le coût des simulations. De plus, l'évaporation de la phase liquide et donc la combustion ne sont pas traitées, ce qui réduit singulièrement la complexité. Néanmoins ces simulations sont et seront très utiles à la compréhension du processus d'atomisation primaire. Elles pourront aussi servir de base de validation pour le développement de modèles simplifiés, notamment pour la simulation aux grandes échelles.

Simulation aux grandes échelles

La simulation aux grandes échelles ou Large Eddy Simulation (LES) est une approche développée à l'origine pour décrire les écoulements monophasiques turbulents. Elle consiste à décomposer les champs décrits par les équations de Navier-Stokes en une partie résolue qui correspond aux grandes échelles de l'écoulement (captées par le maillage), et en une partie non résolue correspondant aux échelles de sous-maille (non captées par le maillage). L'effet des structures turbulentes de sous-maille sur les échelles résolues doit alors être modélisé. L'intérêt de la LES par rapport à la DNS est qu'elle permet l'utilisation de maillages moins raffinés, et implique donc un coût de calcul moins élevé. La littérature concernant la fermeture des termes de sous-maille en LES est très fournie dans la cas des écoulements monophasiques (cf. § 5.4). En revanche, les cas d'application de la LES aux écoulements diphasiques, et en particulier à l'atomisation des jets liquides, sont peu nombreux. CHESNEL [42] met en évidence deux façons différentes d'aborder la question :

2. Les configurations simulées dans ces travaux sont représentatives des jets libres issus des injecteurs Diesel.

(i) Supposons que pour une application donnée, la taille des plus petites structures liquides issues de l'atomisation soit supérieure à l'échelle de Kolmogorov. Il existe alors un raffinement de maillage qui permet de capter ces plus petites structures liquides mais pas l'échelle de Kolmogorov. Dans ce cas, il semble possible d'utiliser une approche LES "classique" pour décrire la turbulence, associée (mais non couplée) à une approche tout aussi "classique" de pseudo-DNS pour l'atomisation, c'est-à-dire qui utilise les méthodes de capture d'interface décrites précédemment. D'une certaine façon, cette vision découplée constitue l'approche la plus simple. Elle a été utilisée par de VILLIERS et al. [56], BIANCHI et al. [22] ou encore DESJARDINS et al. [63], généralement en associant la méthode VOF/PLIC pour la capture d'interface, et le concept de viscosité turbulente avec le modèle classique de SMAGORINSKY [255] pour la LES. Cependant, certains auteurs ont relevé que l'interface, même bien résolue, a une influence sur la turbulence. L'effet est comparable à celui des parois pour les écoulements monophasiques : les contraintes de cisaillement réduisent la dissipation turbulente. C'est d'ailleurs pour cela qu'il existe une version amortie du modèle de Smagorinsky (cf. § 5.4.4), limitant la dissipation de sous-maille en tenant compte de la distance aux parois. Suivant cette idée, dans le contexte de la LES en diphasique, certains auteurs proposent de limiter le modèle de Smagorinsky par la distance à l'interface (LIOVIC et LAKEHAL [181], REBOUX et al. [222]). Pour cela, il suffit par exemple d'utiliser la fonction Level Set.

(ii) Supposons maintenant que la taille des plus petites structures liquides soit du même ordre que l'échelle de Kolmogorov, ou bien que le maillage utilisé ne permette de capter ni l'une ni l'autre de ces échelles. Dans ce cas, CHESNEL [42] indique qu'il faut probablement établir une modélisation traduisant l'effet des interactions entre les structures liquides et turbulentes en sous-maille.

La pertinence respective de ces deux points de vue s'évalue également au regard de la topologie de l'écoulement diphasique. Typiquement, le point (i) peut constituer une approche satisfaisante pour décrire les zones à "phases séparées" d'un jet atomisé, c'est-à-dire à proximité de la sortie de l'injecteur, là où l'interface peut encore être bien captée. Tandis que la vision (ii) semble s'imposer dans la zone à "phase dispersée", située plus en aval de l'injecteur, là où le maillage n'est plus assez fin pour capter l'interface.

Partant de ce constat, CHESNEL et al. [40] proposent une stratégie permettant de rendre compte de l'interaction entre les échelles turbulentes de sous-maille et l'interface mal résolue dans la zone du spray. Il s'agit d'appliquer la stratégie décrite dans le point (i) ci-dessus (capture de l'interface par une approche couplée VOF / Level Set tant que le maillage le permet), en y ajoutant un ingrédient supplémentaire : une équation de transport pour la ***densité d'aire interfaciale***. Cette grandeur, classiquement notée Σ, caractérise la quantité d'interface présente dans chaque volume de contrôle. Ainsi, pour une même fraction volumique de liquide, une densité d'aire interfaciale plus ou moins importante trahit la topologie de l'écoulement en sous-maille. L'équation de transport sur Σ contient un certain nombre de termes sources et puits qui décrivent sa production et sa destruction, générées entre autres par la turbulence. La modélisation de ces différents termes reste assez empirique. A ce titre, beaucoup de versions différentes ont été proposées, comme nous le verrons en § 3.3.3.

Le second volet des travaux de thèse de CHESNEL [42], publiés dans CHESNEL et al. [41], concerne spécifiquement la modélisation des termes turbulents de sous-maille pour la LES de l'atomisation. Il effectue ainsi une analyse *a priori* de différents modèles de fermeture LES. L'idée est d'utiliser des résultats DNS de l'atomisation d'un jet liquide turbulent, obtenus en appliquant la stratégie mise en place par MÉNARD et al. [192] (cf. § 3.2.1) : résolution des équations de Navier-Stokes incompressibles, capture de l'interface par une approche couplée Level Set / VOF, utilisation des relations de saut à l'interface et de la méthode CSF pour décrire la tension de surface. L'analyse *a priori* d'un modèle LES consiste alors à comparer les termes de sous-maille obtenus lorsque l'on applique ledit modèle LES au champ DNS filtré, aux mêmes termes de sous-maille obtenus en calculant la différence entre le champ DNS initial et le champ DNS filtré. Ce faisant, il met en évidence deux conclusions principales :

- l'évolution de l'interface n'est pas seulement le résultat de la convection des grandes échelles. L'impact des échelles non résolues doit être pris en compte.
- un modèle de similarité d'échelles [3] est mieux adapté que le modèle classique de Smagorinsky.

3.3 Modèles à interface diffuse

Contrairement aux modèles à capture d'interface évoqués précédemment, les modèles à interface diffuse n'effectuent aucune reconstruction de l'interface. Celle-ci est étalée sur plusieurs maille sous l'effet de la diffusion numérique. Il n'existe plus de distinction précise entre les phases, alors même que la physique implique la présence de discontinuités nettes. Il est cependant possible de décrire l'écoulement diphasique selon ce point de vue

3. Ce modèle, proposé initialement par BARDINA et al. [13], considère que la structure statistique du tenseur de sous-maille est similaire à celle du même tenseur construit sur les plus petites échelles résolues. L'information sur les échelles résolues est donc utilisée pour fermer les termes de sous-maille. Davantage de détails sont disponibles dans les revues MENEVEAU et KATZ [193], SAGAUT [235] et GARNIER [103].

en adoptant une démarche rigoureuse, consistant à homogénéiser les équations de chaque phase. Nous utiliserons ici la dénomination de ***modèle général homogénéisé*** pour désigner le système d'équations ainsi obtenu. L'objectif de cette partie est de présenter de manière synthétique la dérivation du modèle général homogénéisé, ainsi que ses relaxations possibles. Il ne s'agit pas d'une présentation détaillée, disponible par ailleurs dans ISHII [144], DELHAYE [57], DREW [74], ABGRALL et SAUREL [4], ou encore dans les thèses de MEYERS [194] et LABOIS [162].

3.3.1 Etablissement du modèle général homogénéisé

Par souci de simplicité, nous ne considérons ici que des écoulements non réactifs et ne possédant qu'une seule espèce par phase. Cependant, l'extension au cas de plusieurs espèces réactives ne pose pas de problème particulier, elle requiert seulement d'ajouter les équations de transport et les termes sources adéquats. Par ailleurs, on introduit pour la suite l'indice $k \in [1, 2]$ qui désigne le numéro de chaque phase. L'extension à un nombre de phases supérieur est également possible (ZUZIO et al. [308]). On introduit le domaine d'observation total Ω, indépendant du temps, mais composé à l'instant t de l'union des sous-domaines $\Omega_k(t)$ de l'espace, occupés par les phases k. L'interface entre les deux phases, c'est-à-dire la frontière entre les domaines $\Omega_k(t)$, est notée $\partial\Omega_k(t)$.

3.3.1.1 Équations de bilan monophasiques

Un écoulement diphasique est un ensemble de régions composées d'une seule phase et séparées par des interfaces en mouvement. De plus, même dans le cas où les inclusions monophasiques sont de taille très réduite, elles restent bien plus grandes que les échelles moléculaires. La mécanique des milieux continus est donc applicable, et il est possible de décrire chaque région en utilisant les équations de conservation classiques monophasiques. Dans le cas général, il s'agit des équations de Navier-Stokes compressibles, écrites en (3.2) pour une phase k.

$$\begin{array}{lcll} \dfrac{\partial \rho_k}{\partial t} & + & \nabla \cdot (\rho_k \boldsymbol{u}_k) & = & 0 \\ \dfrac{\partial \rho_k \boldsymbol{u}_k}{\partial t} & + & \nabla \cdot (\rho_k \boldsymbol{u}_k \otimes \boldsymbol{u}_k) & = & \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}_k - P_k \boldsymbol{I}) + \boldsymbol{f}_k \\ \dfrac{\partial \rho_k e_{t,k}}{\partial t} & + & \nabla \cdot \left[(\rho_k e_{t,k} + P_k) \boldsymbol{u}_k \right] & = & \nabla \cdot \left(\boldsymbol{\tau}_k \cdot \boldsymbol{u}_k - \boldsymbol{J}_{e_{t,k}} \right) + \boldsymbol{f}_k \cdot \boldsymbol{u}_k \end{array} \tag{3.2}$$

Dans les équations (3.2), ρ_k désigne la masse volumique de la phase k, $\boldsymbol{u}_k$ est son vecteur vitesse et P_k sa pression, $\boldsymbol{f}_k$ représente le vecteur des forces volumiques appliquées à la phase k, $\boldsymbol{\tau}_k$ est le tenseur des contraintes visqueuses, et $\boldsymbol{I}$ le tenseur identité. Enfin, $e_{t,k}$ désigne l'énergie totale de la phase k, somme de son énergie interne et de son énergie cinétique, et $\boldsymbol{J}_{e_{t,k}}$ est le flux d'énergie totale. Les équations (3.2) sont valides en tout point du domaine Ω, sauf aux interfaces, où il existe des sauts de masse, de quantité de mouvement et d'énergie qui sont exprimés par les relations de saut (3.3).

$$\begin{array}{lcl} \displaystyle\sum_{k=1}^{2} \rho_k \left(\boldsymbol{u}_k - \boldsymbol{w}_I \right) \cdot \boldsymbol{n}_k & = & 0 \\ \displaystyle\sum_{k=1}^{2} \left[\rho_k \boldsymbol{u}_k \otimes (\boldsymbol{u}_k - \boldsymbol{w}_I) - (\boldsymbol{\tau}_k - P_k \boldsymbol{I}) \right] \cdot \boldsymbol{n}_k & = & \boldsymbol{M}_I^{\sigma} \\ \displaystyle\sum_{k=1}^{2} \left[\rho_k e_{t,k} \left(\boldsymbol{u}_k - \boldsymbol{w}_I \right) - (\boldsymbol{\tau}_k - P_k \boldsymbol{I}) \cdot \boldsymbol{u}_k + \boldsymbol{J}_{e_{t,k}} \right] \cdot \boldsymbol{n}_k & = & E_I^{\sigma} \end{array} \tag{3.3}$$

Dans ces relations, $\boldsymbol{w}_I$ désigne le vecteur vitesse de l'interface et $\boldsymbol{n}_k$ est le vecteur unitaire normal à l'interface et orienté vers l'extérieur de la phase k. $\boldsymbol{M}_I^{\sigma}$ et E_I^{σ} représentent la quantité de mouvement et l'énergie associées notamment à la tension de surface au niveau de l'interface. Leur expression formelle fait intervenir le coefficient de tension de surface σ et les propriétés de l'interface : sa vitesse, son rayon de courbure, et son vecteur normal.

3.3.1.2 Procédé d'homogénéisation : extension des équations à l'ensemble du domaine

L'étape suivante consiste à étendre les équations (3.2), valables uniquement sur les sous-ensembles Ω_k, à l'ensemble du domaine Ω, y compris aux interfaces. Cette démarche est nommée ***procédé d'homogénéisation***. Pour cela, la stratégie consiste à introduire la fonction indicatrice de phase $\chi_k(\boldsymbol{x}, t)$, définie telle que :

$$\chi_k(\boldsymbol{x}, t) = \begin{cases} 1 & \text{si } \boldsymbol{x} \in \Omega_k(t) \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \tag{3.4}$$

La fonction χ_k n'est pas continue, aussi sa différenciation doit être considérée ***au sens des distributions***. Notamment, on peut écrire le gradient de χ_k sous la forme suivante :

$$\nabla\chi_k(\boldsymbol{x},t) = -\delta_{ik}\boldsymbol{n}_k \,, \tag{3.5}$$

où δ_{ik} est la distribution de Dirac caractéristique de l'interface $\partial\Omega_k(t)$, et $\boldsymbol{n}_k$ désigne toujours le vecteur unitaire normal à l'interface et orienté vers l'extérieur de la phase k. Avec cette définition, le gradient $\nabla\chi_k$ est donc nul partout, sauf au niveau de l'interface. La fonction indicatrice $\chi_k(\boldsymbol{x},t)$ vérifie des ***relations mathématiques particulières***, définies au sens des distributions (on pourra trouver leur expression dans les thèses de MEYERS [194] et LABOIS [162] par exemple).

Les équations bilans monophasiques (3.2) sont ensuite multipliées par la fonction indicatrice de phase $\chi_k(\boldsymbol{x},t)$, laquelle peut être introduite à l'intérieur des opérateurs différentiels en utilisant les propriétés mathématiques susmentionnées. Ce faisant, le système (3.2) devient :

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial \chi_k\rho_k}{\partial t} + \nabla\cdot(\chi_k\rho_k\boldsymbol{u}_k) = 0 \\
&\qquad\qquad -\rho_k(\boldsymbol{u}_k-\boldsymbol{w}_I)\cdot\boldsymbol{n}_k\delta_{ik} \\
&\frac{\partial \chi_k\rho_k\boldsymbol{u}_k}{\partial t} + \nabla\cdot(\chi_k\rho_k\boldsymbol{u}_k\otimes\boldsymbol{u}_k) = \nabla\cdot\left[\chi_k(\boldsymbol{\tau}_k - P_k\boldsymbol{I})\right] + \chi_k\boldsymbol{f}_k \\
&\qquad\qquad -\left[\rho_k\boldsymbol{u}_k\otimes(\boldsymbol{u}_k-\boldsymbol{w}_I) - (\boldsymbol{\tau}_k - P_k\boldsymbol{I})\right]\cdot\boldsymbol{n}_k\delta_{ik} \\
&\frac{\partial \chi_k\rho_k e_{t,k}}{\partial t} + \nabla\cdot\left[\chi_k(\rho_k e_{t,k}+P_k)\boldsymbol{u}_k\right] = \nabla\cdot\left[\chi_k\left(\boldsymbol{\tau}_k\cdot\boldsymbol{u}_k - \boldsymbol{J}_{e_{t,k}}\right)\right] + \chi_k\boldsymbol{f}_k\cdot\boldsymbol{u}_k \\
&\qquad\qquad -\left[\rho_k e_{t,k}(\boldsymbol{u}_k-\boldsymbol{w}_I) - (\boldsymbol{\tau}_k - P_k\boldsymbol{I})\cdot\boldsymbol{u}_k + \boldsymbol{J}_{e_{t,k}}\right]\cdot\boldsymbol{n}_k\delta_{ik}
\end{aligned} \tag{3.6}$$

Les équations (3.6) sont maintenant valides dans tout le domaine Ω, y compris aux interfaces. Les termes en rouge correspondent à des flux de masse, de quantité de mouvement et d'énergie à travers l'interface. Ils doivent être modélisés.

3.3.1.3 Écriture d'équations aux grandeurs moyennes

Nous venons de voir les équations générales du modèle homogénéisé dans leur formulation locale instantanée. Cependant, en pratique, le sous-domaine $\Omega_k(t)$ occupé par la phase k est susceptible de décrire des inclusions de petite taille (gouttes ou bulles par exemple), potentiellement inférieure à la résolution du maillage utilisé pour la simulation numérique. Dans ce cas, les équations (3.6) ne peuvent pas être utilisées en l'état, elles doivent être moyennées. On introduit ainsi l'opérateur de moyenne d'ensemble $\langle\bullet\rangle$, dont on fait l'hypothèse qu'il est ***linéaire*** ($\langle a+b\rangle = \langle a\rangle + \langle b\rangle$), ***idempotent*** ($\langle\langle a\rangle\rangle = \langle a\rangle$), et ***commute*** avec les opérateurs différentiels. On peut alors décomposer toute grandeur locale instantanée ϕ en la somme $\phi = \langle\phi\rangle + \phi'$ d'une valeur moyenne et d'une valeur fluctuante ϕ', telle que $\langle\phi'\rangle = 0$. Cette décomposition n'est autre que la décomposition de Reynolds, introduite à l'origine dans le contexte des écoulements monophasiques turbulents. Nous introduisons ensuite α_k, défini formellement en appliquant l'opérateur de moyenne à la fonction indicatrice de phase :

$$\alpha_k = \langle\chi_k\rangle \,. \tag{3.7}$$

En faisant l'hypothèse ergodique [4], le terme α_k peut s'interpréter comme la fraction volumique de la phase k. Définissons ensuite la moyenne phasique $\overline{\bullet}$ d'une grandeur ϕ_k quelconque :

$$\overline{\phi_k} = \frac{\langle\chi_k\phi_k\rangle}{\langle\chi_k\rangle} = \frac{\langle\chi_k\phi_k\rangle}{\alpha_k} \,. \tag{3.8}$$

Appliquée à la masse volumique ρ_k, cela donne la masse volumique phasique moyenne $\overline{\rho_k} = \langle\chi_k\rho_k\rangle/\alpha_k$, laquelle permet ensuite de définir la moyenne de Favre $\widetilde{\bullet}$:

$$\widetilde{\phi_k} = \frac{\langle\chi_k\rho_k\phi_k\rangle}{\alpha_k\overline{\rho_k}} \,. \tag{3.9}$$

La moyenne de Favre a été introduite initialement pour étudier les écoulements turbulents compressibles, elle permet de simplifier l'écriture des moyennes appliquées aux champs de vitesse et d'énergie. Toute grandeur phasique ϕ_k peut donc aussi s'écrire à partir de la décomposition de Favre, $\phi_k = \widetilde{\phi_k} + \phi_k''$, où la fluctuation ϕ_k'' vérifie l'égalité $\widetilde{\phi_k''} = 0$. La suite du processus d'homogénéisation consiste alors à effectuer les opérations suivantes, dont on ne donne pas ici les détails calculatoires (voir pour cela les ouvrages de référence de ISHII [144] et DREW [74], ou encore les thèses de MEYERS [194] et LABOIS [162]) :

4. L'opérateur de moyenne d'ensemble $\langle\bullet\rangle$ est supposé équivalent à la moyenne volumique (spatiale).

(i) Appliquer l'opérateur de moyenne $\langle\bullet\rangle$ aux équations (3.6), en utilisant ses propriétés de linéarité, d'idempotence et de commutativité par rapport aux opérateurs différentiels.

(ii) Utiliser les définitions (3.8) et (3.9) de la moyenne phasique et de la moyenne de Favre pour introduire dans les équations (3.6) la fraction volumique α_k, ainsi que les différentes grandeurs phasiques moyennes et leurs fluctuations : $\overline{\rho_k}$, $\widetilde{\boldsymbol{u}_k}$, $\boldsymbol{u}_k''$...

(iii) Simplifier l'écriture des équations en faisant des hypothèses sur la forme de certains termes et en introduisant des notations pour les termes non fermés.

En procédant ainsi, le système d'équations (3.10) est obtenu.

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial \alpha_k \overline{\rho_k}}{\partial t} && + && \nabla\cdot\left(\alpha_k \overline{\rho_k}\widetilde{\boldsymbol{u}_k}\right) && = && +\Gamma_{k_I} \\
&\frac{\partial \alpha_k \overline{\rho_k}\widetilde{\boldsymbol{u}_k}}{\partial t} && + && \nabla\cdot\left(\alpha_k \overline{\rho_k}\widetilde{\boldsymbol{u}_k}\otimes\widetilde{\boldsymbol{u}_k}\right) && = && \nabla\cdot\left[\alpha_k\left(\overline{\boldsymbol{\tau}_k}+\boldsymbol{\tau}_k^T-\overline{P_k}\boldsymbol{I}\right)\right]+\alpha_k\overline{\boldsymbol{f}_k} \\
& && && && && +P_{k_I}\nabla\alpha_k+\boldsymbol{F}_{k_I}+\boldsymbol{M}_{\Gamma_{k_I}} \\
&\frac{\partial\left[\alpha_k\left(\overline{\rho_k}\widetilde{e_{t,k}}+E_{c,k}^T\right)\right]}{\partial t} && + && \nabla\cdot\left[\alpha_k\left(\overline{\rho_k}\widetilde{e_{t,k}}+\overline{P_k}+E_{c,k}^T\right)\widetilde{\boldsymbol{u}_k}\right] && = && \nabla\cdot\left[\alpha_k\left(\overline{\boldsymbol{\tau}_k}\cdot\widetilde{\boldsymbol{u}_k}-\left(\overline{\boldsymbol{J}_{e_{t,k}}}+\boldsymbol{J}_{e_{t,k}}^T\right)\right)\right] \\
& && && && && +\alpha_k\overline{\boldsymbol{f}_k\cdot\boldsymbol{u}_k} \\
& && && && && +H_{\Gamma_{k_I}}-P_{k_I}\frac{\partial\alpha_k}{\partial t}+\boldsymbol{F}_{k_I}\cdot\boldsymbol{u}_{k_I}+Q_{k_I}
\end{aligned}
\qquad \mathbf{k}\in\{\mathbf{1},\mathbf{2}\} \tag{3.10}
$$

Les termes $\boldsymbol{\tau}_k^T$, $\boldsymbol{J}_{e_{t,k}}^T$ et $E_{c,k}^T$ sont des notations utilisées pour simplifier l'écriture des termes fluctuants :

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\tau}_k^T &= -\overline{\rho_k \boldsymbol{u}_k''\otimes\boldsymbol{u}_k''}\,, \\
\boldsymbol{J}_{e_{t,k}}^T &= \overline{\rho_k h_{t,k}''\boldsymbol{u}_k''}-\overline{\boldsymbol{\tau}_k\cdot\boldsymbol{u}_k''}\,, \\
E_{c,k}^T &= \frac{1}{2}\overline{\rho_k u_k''^2}\,,
\end{aligned}
\tag{3.11}
$$

où $h_{t,k} = e_{t,k} + P_k/\rho_k$ est l'enthalpie totale de la phase k. Les termes sources inhérents aux échanges interfaciaux (représentés en rouge) sont formellement définis dans le Tableau 3.2, dans lequel $\boldsymbol{u}_{k_I}$ et P_{k_I} désignent respectivement la vitesse et la pression de la phase k à l'interface. Par ailleurs, il doit y avoir conservation des transferts interfaciaux, ce qui implique :

$$
\sum_{k=1}^{2}\Gamma_{k_I}=0,\quad \sum_{k=1}^{2}\boldsymbol{F}_{k_I}=\boldsymbol{0},\quad \sum_{k=1}^{2}Q_{k_I}=0,\quad \sum_{k=1}^{2}P_{k_I}\nabla\alpha_k=0\,. \tag{3.12}
$$

La dernière relation conduit à l'égalité des pressions interfaciales : $P_{1_I} = P_{2_I}$. On peut donc noter P_I l'unique pression interfaciale. Il reste à déterminer des fermetures pour tous ces termes sources.

3.3.1.4 Fermeture du modèle général

Le système d'équations aux grandeurs moyennes (3.10) constitue une formulation générale pour décrire les écoulements diphasiques. Cependant, ce système contient un certain nombre de termes non fermés, pour lesquels il convient de proposer une modélisation. Ces différentes fermetures peuvent être regroupées en plusieurs catégories, détaillées ci-dessous.

Fermeture des termes fluctuants $\boldsymbol{\tau}_k^T$, $\boldsymbol{J}_{e_{t,k}}^T$ et $E_{c,k}^T$

Les termes fluctuants $\boldsymbol{\tau}_k^T$, $\boldsymbol{J}_{e_{t,k}}^T$ et $E_{c,k}^T$, ressemblent fortement aux termes qui apparaissent lorsque les équations de Navier-Stokes monophasiques sont moyennées afin d'isoler les termes fluctuants liés à la turbulence. Cependant, il est important de noter que dans le cas présent, ces termes caractérisent les fluctuations des variables causées par la présence d'une ***interface mobile en sous-maille***, et non pas causées par la turbulence en sous-maille. Pour isoler les fluctuations des variables en sous-maille dues à la turbulence, il est nécessaire d'opérer une seconde procédure de moyenne ajoutée au processus d'homogénéisation, point qui ne sera pas détaillé ici.

Terme	Définition	Description
Γ_{k_I}	$-\langle \rho_k (\boldsymbol{u}_k - \boldsymbol{w}_I) \cdot \boldsymbol{n}_k \delta_{ik} \rangle$	transfert de masse à l'interface
$P_{k_I} \nabla \alpha_k$	$-\langle P_k \boldsymbol{n}_k \delta_{ik} \rangle$	termes non conservatifs
$\boldsymbol{F}_{k_I}$	$\langle \boldsymbol{\tau}_k \cdot \boldsymbol{n}_k \delta_{ik} \rangle$	forces de frottement visqueux s'exerçant sur la phase k à l'interface
$\boldsymbol{M}_{\Gamma_{k_I}}$	$-\langle \rho_k \boldsymbol{u}_k \otimes (\boldsymbol{u}_k - \boldsymbol{w}_I) \cdot \boldsymbol{n}_k \delta_{ik} \rangle$	terme source de QDM associé au transfert de masse
$H_{\Gamma_{k_I}}$	$-\langle \rho_k h_{t,k} (\boldsymbol{u}_k - \boldsymbol{w}_I) \cdot \boldsymbol{n}_k \delta_{ik} \rangle$	terme source d'énergie associé au transfert de masse
$P_{k_I} \dfrac{\partial \alpha_k}{\partial t}$	$\langle P_k \boldsymbol{w}_I \cdot \boldsymbol{n}_k \delta_{ik} \rangle$	termes non conservatifs
$\boldsymbol{F}_{k_I} \cdot \boldsymbol{u}_{k_I}$	$\langle (\boldsymbol{\tau}_k \cdot \boldsymbol{u}_k) \cdot \boldsymbol{n}_k \delta_{ik} \rangle$	puissance des contraintes visqueuses à l'interface
Q_{k_I}	$-\left\langle \boldsymbol{J}_{e_{t,k}} \cdot \boldsymbol{n}_k \delta_{ik} \right\rangle$	échanges interfaciaux de chaleur

TABLEAU 3.2 – ***Expression des termes d'échanges interfaciaux dans le système*** (3.10)**.**

Les systèmes d'équations qui en résultent sont assez complexes, et par ailleurs leur fermeture requiert un effort important de modélisation. En effet, si la modélisation de la turbulence pour les écoulements monophasiques est déjà un sujet complexe, elle l'est encore davantage pour les écoulements diphasiques. L'influence de la turbulence d'une phase sur la dynamique de l'autre phase est très difficile à appréhender. La difficulté principale réside dans le caractère spécifique de chaque configuration. Il est impossible d'établir des lois générales, qui puissent s'appliquer, par exemple, aussi bien à des gouttes de liquide dans un gaz, qu'à des bulles de vapeur dans un liquide. Pour une revue des modèles numériques décrivant la turbulence des écoulements diphasiques fluide-particules, voir CROWE et al. [51], DREW [73] et EMRE [87]. Voir également les références plus spécifiques FÉVRIER et al. [98], KAUFMANN et al. [157], RIBER et al. [229] et MASSOT [187].

Lois de comportement propres aux phases

Il s'agit de définir les lois d'état qui lient les variables thermodynamiques, du type $\overline{P_k} = f(\overline{\rho_k}, \widetilde{e_{t_k}})$, et d'établir l'expression des tenseurs des contraintes visqueuses $\overline{\boldsymbol{\tau}_k}$, des flux d'énergie $\overline{\boldsymbol{J}_{e_{t,k}}}$, et des forces de volume $\overline{\boldsymbol{f}_k}$. De la même manière que pour les termes turbulents, la modélisation de ces termes, bien établie dans le cas monophasique, est compliquée par la présence d'une autre phase dont on ne connait pas précisément la localisation. C'est le cas, par exemple, de l'expression du tenseur des contraintes, pour lequel ISHII [144] propose d'ajouter à l'expression classique monophasique [5] un terme dû à l'effet de la phase dispersée. Mais encore une fois, l'expression de ce terme suppose que la topologie de l'interface est bien établie en sous-maille.

Modélisation du comportement microscopique à l'interface

Les termes P_I et $\boldsymbol{u}_{k_I}$ qui désignent respectivement la pression interfaciale et les vitesses interfaciales de chaque phase, doivent être modélisés. En ce qui concerne les vitesses, remarquons tout d'abord qu'il y a égalité des vitesses des phases à l'interface en l'absence de transfert de masse. Dans ce cas, on peut noter $\boldsymbol{u}_I$ la vitesse moyenne de l'interface, avec par définition $\boldsymbol{u}_I = \boldsymbol{u}_{1_I} = \boldsymbol{u}_{2_I} = \langle \boldsymbol{w}_I \rangle$. Un certain nombre de modélisations différentes pour la vitesse interfaciale ont été proposées dans la littérature. Par exemple, l'approche de SAUREL et ABGRALL [237], MURRONE et GUILLARD [201], MURRONE [200], consiste à utiliser la vitesse du centre de masse des deux phases :

$$\boldsymbol{u}_I = \frac{\alpha_1 \overline{\rho_1} \widetilde{\boldsymbol{u}_1} + \alpha_2 \overline{\rho_2} \widetilde{\boldsymbol{u}_2}}{\alpha_1 \overline{\rho_1} + \alpha_2 \overline{\rho_2}} \,. \tag{3.13}$$

Concernant la pression interfaciale, une première approche consiste à supposer l'égalité des pressions :

$$P_I = \overline{P_1} = \overline{P_2} \,. \tag{3.14}$$

C'est l'hypothèse adoptée dans les travaux précurseurs d'ISHII [144] et dans certains codes industriels de simulation, notamment dans le domaine de la thermo-hydraulique nucléaire (GUELFI et al. [118]). Elle est justifiée par les temps extrêmement courts de relaxation des pressions vers l'équilibre (cf. § 3.3.2). Le système d'équations obtenu est

5. Pour un fluide newtonien monophasique, le tenseur des contraintes est supposé proportionnel au tenseur des déformations via la viscosité (voir le Chapitre 5).

alors fermé, sans ajout d'équation supplémentaire. On parle de ***modèle à 6 équations*** [6] : une équation sur la masse, la quantité de mouvement et l'énergie pour chaque phase. Malheureusement, il est désormais bien établi que la structure mathématique de ce modèle pose des difficultés lors de sa résolution numérique. Précisément, le système d'équations aux dérivées partielles est ***non-hyperbolique*** (STEWART et WENDROFF [260]), et est donc mal posé au sens d'HADAMARD [125].

Selon une approche différente proposée par BAER et NUNZIATO [11] et développée ensuite par SAUREL et ABGRALL [237], l'hypothèse d'égalité des pressions est relaxée. Elle est remplacée par l'ajout d'une équation supplémentaire, appelée ***équation topologique***, qui porte le nombre d'équations résolues à sept. Le système obtenu est ainsi nommé ***modèle à 7 équations***, ou de manière équivalente ***modèle de Baer-Nunziato*** en référence aux premiers auteurs qui ont proposé cette méthode de fermeture. L'avantage de cette approche est que le système d'équations aux dérivées partielles obtenu est ***inconditionnellement hyperbolique*** (SAUREL et ABGRALL [237]).

L'équation topologique est une équation de transport de la fraction volumique, obtenue formellement à partir de l'équation d'advection de la fonction indicatrice de phase. En effet, d'après les propriétés de différenciation au sens des distributions de la fonction $\chi_k(\boldsymbol{x}, t)$, on peut montrer que celle-ci vérifie l'équation d'advection :

$$\frac{\partial \chi_k}{\partial t} + \boldsymbol{w}_I \cdot \nabla \chi_k = 0 \,. \tag{3.15}$$

En appliquant l'opérateur de moyenne $\langle \bullet \rangle$ à cette équation, en utilisant la relation (3.7), puis en supposant d'une part que le terme $\langle \boldsymbol{w}_I \cdot \nabla \chi_k \rangle$ se décompose en un terme de transport et un terme de production / destruction :

$$\langle \boldsymbol{w}_I \cdot \nabla \chi_k \rangle = \boldsymbol{u}_\alpha \cdot \nabla \alpha_k - \dot{\alpha}_{k_I} \,, \tag{3.16}$$

et d'autre part que la vitesse de transport de la fraction volumique s'identifie à la vitesse de l'interface :

$$\boldsymbol{u}_\alpha = \boldsymbol{u}_I \,, \tag{3.17}$$

nous obtenons finalement l'équation de transport (3.18) pour la fraction volumique d'une phase k.

$$\boxed{\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \boldsymbol{u}_I \cdot \nabla \alpha_k = \dot{\alpha}_{k_I} \qquad \mathbf{k} \in \{\mathbf{1}, \mathbf{2}\}} \tag{3.18}$$

Évidemment, la relation $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$ permet de ne résoudre qu'une seule équation topologique, au choix pour $k = 1$ ou $k = 2$. Le nouveau terme de variation de la fraction volumique $\dot{\alpha}_{k_I}$ doit alors être modélisé, de même que le terme de pression interfaciale P_I. Encore une fois, plusieurs fermetures ont été proposées dans la littérature. SAUREL et ABGRALL [237] et MURRONE et GUILLARD [201] utilisent une moyenne pondérée par les fractions volumiques :

$$P_I = \alpha_1 P_1 + \alpha_2 P_2 \,. \tag{3.19}$$

D'autres fermetures ont été proposées, notamment par COQUEL et al. [48], GALLOUËT et al. [102] ou encore LABOIS [162]. On notera que que les différentes fermetures peuvent influencer certaines propriétés mathématiques du système : existence d'une entropie mathématique, champs caractéristiques vraiment non linéaires ou linéairement dégénérés.

Modélisation des termes d'échanges interfaciaux

Il est possible de distinguer trois catégories de termes sources qui décrivent les échanges entre phases au niveau de l'interface :

(i) Termes liés au transfert de masse Γ_{k_i}, $\boldsymbol{M}_{\Gamma_{k_i}}$ (quantité de mouvement associée) et $H_{\Gamma_{k_i}}$ (enthalpie associée). D'un point de vue physique, les transferts de masse entre phases sont à rapprocher des phénomènes d'évaporation et de condensation.

(ii) Transfert de quantité de mouvement sans transfert de masse, $\boldsymbol{F}_{k_i}$. Ce terme rend compte principalement de la force de traînée, mais d'autres forces peuvent parfois avoir une influence non négligeable (portance, masse ajoutée...).

(iii) Transfert d'énergie sans transfert de masse, Q_{k_i}. Il s'agit typiquement du flux thermique entre les phases résultant d'un différentiel de température.

6. Ce nombre d'équations correspond au cas simpliste de phases mono-espèce, et à une seule dimension spatiale.

A ce stade, il est utile de remarquer que les relations (3.12) permettent d'écrire les termes de transferts indépendamment de la phase, puisque nous n'avons considéré que deux phases. Il en est de même d'ailleurs pour $\dot{\alpha}_{k_I}$. Ainsi, nous pouvons écrire par exemple :

$$\Gamma_I = \Gamma_{1_I} = -\Gamma_{2_I}, \quad \boldsymbol{F}_I = \boldsymbol{F}_{1_I} = -\boldsymbol{F}_{2_I}, \quad Q_I = Q_{1_I} = -Q_{2_I}, \quad \dot{\alpha}_I = \dot{\alpha}_{1_I} = -\dot{\alpha}_{2_I} \, . \tag{3.20}$$

En suivant la procédure proposée par LABOIS [162], ces termes peuvent ensuite être écrits en fonction de variations à travers l'interface et de temps de relaxation :

$$\begin{array}{rclcrcl} \Gamma_I & = & \dfrac{\mu_g}{\epsilon_g}\left(\dfrac{g_2}{T_2} - \dfrac{g_1}{T_1}\right) & & Q_I & = & \dfrac{\mu_T}{\epsilon_T}\left(T_2 - T_1\right) \\ \boldsymbol{F}_I & = & \dfrac{\mu_u}{\epsilon_u}\left(\boldsymbol{u}_2 - \boldsymbol{u}_1\right) & & \dot{\alpha}_I & = & \dfrac{\mu_P}{\epsilon_P}\left(P_1 - P_2\right) \end{array} \, . \tag{3.21}$$

Dans les relations (3.21), g_1 et g_2 sont les potentiels chimiques, tandis que μ_g, μ_u, μ_T et μ_P sont des termes à définir par analyse dimensionnelle pour assurer l'homogénéité des équations. LABOIS [162] propose par exemple :

$$\mu_g = \frac{\alpha_1\rho_1\alpha_2\rho_2}{\alpha_1\rho_1 + \alpha_2\rho_2}, \qquad \mu_u = \rho_1 \text{ ou } \rho_2, \qquad \mu_T = \frac{\alpha_1\rho_1 c_{v,1}\alpha_2\rho_2 c_{v,2}}{\alpha_1\rho_1 c_{v,1} + \alpha_2\rho_2 c_{v,2}}, \qquad \mu_P = \frac{1}{P_I} \, . \tag{3.22}$$

De plus, ϵ_g, ϵ_u, ϵ_T, et ϵ_P sont respectivement les temps de relaxation relatifs au potentiel chimique, à la vitesse, à la température, et à la pression. C'est dans l'expression de ces temps de relaxation que se trouve la modélisation des phénomènes physiques : évaporation, force de traînée, ou transferts de chaleur, par exemple.

3.3.2 Relaxation du modèle général vers des modèles simplifiés

Finalement, le ***modèle à 7 équations*** formé des équations (3.10) et de l'équation topologique (3.18), constitue le modèle ***homogénéisé*** le plus général pour décrire les écoulements diphasiques. Il est néanmoins complexe, notamment en raison du nombre important d'équations à résoudre, ou encore du caractère "inhabituel" de l'équation topologique. En effet, celle-ci n'apparait pas dans les systèmes d'équations monophasiques classiques (Euler ou Navier-Stokes), contrairement aux équations sur la masse, la quantité de mouvement ou l'énergie.

Aussi, nous allons voir que ce modèle général peut être relaxé vers des modèles plus simples. Pour cela, il est intéressant d'effectuer une analyse comparative des différents temps caractéristiques de relaxation. Évidemment, la valeur des temps de relaxation est spécifique à chaque application, elle dépend de la topologie des écoulements et des phénomènes physiques rencontrés. Il est toutefois possible d'établir la hiérarchie suivante, à valeur assez générale (LABOIS [162]) :

$$\epsilon_p \ll \epsilon_u \ll \epsilon_T \ll \epsilon_g \, . \tag{3.23}$$

Cela signifie que les pressions des deux phases relaxent généralement plus rapidement vers l'équilibre que les vitesses, qui elles-mêmes relaxent plus vite vers l'équilibre que les températures. Enfin, les potentiels chimiques sont généralement les grandeurs physiques qui relaxent le plus lentement vers l'équilibre. A partir de ce constat, il apparait raisonnable, suivant l'application et l'objectif recherché en termes de précision, de faire l'hypothèse qu'un ou plusieurs de ces temps de relaxation sont nuls. Ce qui revient, pour la variable concernée, à supposer un équilibre local immédiat et permanent entre les phases.

Il est alors possible de dériver plusieurs sous-modèles en étudiant le comportement asymptotique du modèle général lorsque certains de ces temps de relaxation tendent vers zéro. L'outil mathématique utilisé pour cela est celui des ***développements de Chapman-Enskog***. Nous ne rentrons pas dans les détails à ce sujet ici, et dirigeons le lecteur intéressé vers les travaux de CHEN et al. [39], NATALINI [203] et la thèse de LABOIS [162]. Le Tableau 3.3 propose un résumé des différents sous-modèles obtenus par relaxation du modèle général. Il est à noter que certains des modèles intermédiaires perdent la propriété d'hyperbolicité, ce qui pose des problèmes lors de la résolution numérique.

Le modèle privilégié dans cette étude est le ***modèle à 4 équations***, également appelé ***modèle LHF*** (Locally Homogeneous Flow). Comme nous le verrons dans la Partie II, il fait partie de notre stratégie globale de résolution numérique, permettant notamment de décrire l'écoulement diphasique dans la zone où le liquide est dense. Le système (3.24) ci-dessous reproduit les équations du modèle à 4 équations obtenues par relaxation du modèle à 7 équations en conservant les hypothèses simplificatrices de départ (une seule espèce par phase et pas de termes

NOM DU MODÈLE	VARIABLE RELAXÉE	ÉQUATIONS RÉSOLUES	HYPERBOLICITÉ
MODÈLE À 7 ÉQUATIONS	–	√ 2× masse √ 2× QDM √ 2× énergie √ 1× frac. vol.	OUI
MODÈLE À 6 ÉQUATIONS	Pression	√ 2× masse √ 2× QDM √ 2× énergie	NON
MODÈLE À 5 ÉQUATIONS	P + Vitesse	√ 2× masse √ 1× QDM √ 2× énergie	OUI
MODÈLE À 4 ÉQUATIONS	P,V + Température	√ 2× masse √ 1× QDM √ 1× énergie	OUI
MODÈLE À 3 ÉQUATIONS	P,V,T + Potentiel chimique	√ 1× masse √ 1× QDM √ 1× énergie	OUI

TABLEAU 3.3 – ***Hiérarchie de modèles diphasiques obtenus par relaxation du modèle général.***

sources chimiques).

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial \overline{\rho} Y_1}{\partial t} &+ \quad &\nabla \cdot (\overline{\rho} Y_1 \widetilde{\boldsymbol{u}}) &= \quad &+\Gamma_I \\
&\frac{\partial \overline{\rho} Y_2}{\partial t} &+ \quad &\nabla \cdot (\overline{\rho} Y_2 \widetilde{\boldsymbol{u}}) &= \quad &-\Gamma_I \\
&\frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{\boldsymbol{u}}}{\partial t} &+ \quad &\nabla \cdot (\overline{\rho} \widetilde{\boldsymbol{u}} \otimes \widetilde{\boldsymbol{u}}) &= \quad &\nabla \cdot \left(\overline{\boldsymbol{\tau}} + \boldsymbol{\tau}^T - \overline{P} \boldsymbol{I} \right) + \overline{\boldsymbol{f}} \\
&\frac{\partial \left[\left(\overline{\rho} \widetilde{e_t} + E_c^T \right) \right]}{\partial t} &+ \quad &\nabla \cdot \left[\left(\overline{\rho} \widetilde{e_t} + \overline{P} + E_c^T \right) \widetilde{\boldsymbol{u}} \right] &= \quad &\nabla \cdot \left(\overline{\boldsymbol{\tau}} \cdot \widetilde{\boldsymbol{u}} - \left(\overline{\boldsymbol{J}_{e_t}} + \boldsymbol{J}_{e_t}^T \right) \right) + \overline{\boldsymbol{f} \cdot \boldsymbol{u}}
\end{aligned} \tag{3.24}$$

Dans le système (3.24), les relaxations successives ont conduit à ne plus considérer qu'une seule pression, vitesse et température pour les deux phases. Il reste cependant la prise en compte des deux masses, comme l'indique la présence des fractions massiques Y_1 et Y_2 de chacune des phases. L'unique transfert interfacial restant, noté en rouge, correspond d'ailleurs aux échanges de masse entre les phases.

Il faut noter que le modèle à 4 équations ou LHF n'est autre que le ***système des équations de Navier-Stokes compressibles multi-espèces***. En raison du caractère très répandu des codes résolvant les équations de Navier-Stokes multi-espèces, ce modèle a ainsi été et est largement utilisé pour traiter les écoulements diphasiques. Sa dérivation rigoureuse à partir du modèle à 7 équations permet de préciser les hypothèses sous-jacentes : les phases sont supposées être localement en équilibre instantané de pression, vitesse et température. Les équations de Navier-Stokes compressibles multi-espèces sont présentées plus en détail au Chapitre 5. Nous verrons que des termes supplémentaires apparaissent lorsque l'on considère plusieurs espèces réactives par phase. Il s'agit de termes de diffusion (moléculaire et turbulente) des différentes espèces au sein de leur phase, ainsi que des termes sources de réaction chimique.

3.3.3 Equation de transport pour la densité d'aire interfaciale

Une des difficultés inhérentes aux modèles à interface diffuse (homogénéisés), quels qu'ils soient, est que la modélisation des transferts interfaciaux requiert la connaissance de la ***topologie de l'interface***, ou tout au moins la connaissance de la ***densité d'aire interfaciale***. Par exemple, le taux d'évaporation d'une goutte est directement proportionnel à sa surface, et donc le transfert de masse total dans un volume de contrôle comprenant un certain

nombre de gouttes est proportionnel à la densité d'aire interfaciale. Or, par définition, le procédé d'homogénéisation ***perd l'information sur les détails de l'interface***. Une manière de résoudre le problème consiste à ajouter au modèle une équation de transport sur la densité d'aire interfaciale, notée Σ. Cette approche a été beaucoup développée dans la littérature, comme nous allons le voir ici. Cependant, elle ne résout pas tous les problèmes. En effet, les termes sources (ou termes puits) qui apparaissent dans l'équation de Σ pour traduire sa production (ou sa destruction) doivent être modélisés, et leur modélisation reste assez empirique. Par ailleurs, même à supposer que la localisation de l'interface soit connue en détail, lorsque la topologie est complexe, ce sont parfois les modèles physiques qui faillissent. L'exemple de la force de traînée est singulier. En effet, si le coefficient de traînée de particules sphériques est bien connu, ce n'est plus le cas pour des structures à la forme mal définie (ligaments par exemple).

Forme générale de l'équation sur la densité d'aire interfaciale

L'idée d'une équation de transport sur la densité d'aire interfaciale remonte initialement à ISHII [144] en 1975 [7], qui propose la forme générale

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \nabla \cdot (\boldsymbol{u}_I \Sigma) = S_\Sigma \, . \tag{3.25}$$

Cette relation indique que la densité d'aire interfaciale Σ est une quantité transportée à la vitesse $\boldsymbol{u}_I$ de l'interface, et qui peut croitre ou décroitre sous l'effet d'un terme source noté S_Σ. La densité d'aire interfaciale représente une surface par unité de volume, elle s'exprime donc en m^{-1}. L'équation proposée par ISHII [144] a d'abord été postulée de manière empirique, avant d'être démontrée et justifiée de manière rigoureuse dans des travaux ultérieurs (DREW [73], KOCAMUSTAFAOGULLARI et ISHII [159], MOREL et al. [196], ISHII et al. [145]). Sa modélisation a aussi bénéficié de travaux réalisés dans des domaines autres que les écoulements diphasiques. Ainsi, le concept similaire de la densité de surface de flamme est au cœur du modèle de flamme cohérente (Coherent Flame Model), développé par MARBLE et BROADWELL [184] en combustion turbulente.

Comme nous allons le voir par la suite, l'équation sur la densité d'aire interfaciale a été utilisée le plus souvent dans le cadre des modèles de type "4 équations" (ou LHF), et avec une approche RANS de la turbulence. Dans ce cas, la vitesse de l'interface $\boldsymbol{u}_I$ est identifiée à la vitesse locale moyenne de l'écoulement $\overline{\boldsymbol{u}}$. Après application de l'opérateur de moyenne RANS, il apparait la densité d'aire interfaciale moyenne $\overline{\Sigma}$ et un terme de diffusion dû à la turbulence, noté par exemple $\mathcal{T}_\Sigma$. De plus, si l'on décompose le terme source en un terme de production $\mathcal{P}_\Sigma$ et un terme de destruction $\mathcal{D}_\Sigma$, l'équation sur la densité d'aire interfaciale peut être reformulée en

$$\frac{\partial \overline{\Sigma}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\overline{\boldsymbol{u}}\overline{\Sigma}\right) = \mathcal{T}_\Sigma + \mathcal{P}_\Sigma + \mathcal{D}_\Sigma \, . \tag{3.26}$$

Certains auteurs utilisent la densité d'aire interfaciale massique et non plus volumique, $\Omega = \Sigma/\rho$, exprimée en $\mathrm{m}^2\ \mathrm{kg}^{-1}$. Dans ce cas, en utilisant la définition (3.9) de la moyenne de Favre $\widetilde{\bullet}$, nous avons :

$$\overline{\Sigma} = \overline{\rho\Omega} = \overline{\rho}\widetilde{\Omega} \, . \tag{3.27}$$

On rencontre ainsi parfois l'équation sur la densité d'aire interfaciale exprimée en fonction de $\overline{\rho}\widetilde{\Omega}$ au lieu de $\overline{\Sigma}$. La modélisation du terme de diffusion turbulente est généralement basée sur une loi en gradient classique inspirée des flux de diffusion turbulents des espèces dans les équations de Navier-Stokes (cf. § 5.4.4). Elle est donc du type :

$$\mathcal{T}_\Sigma = \nabla \cdot \left(D_\Sigma \nabla \overline{\Sigma}\right) \, , \tag{3.28}$$

où D_Σ est un coefficient de diffusion turbulente, par exemple calculé comme $D_\Sigma = \nu_t / \mathrm{Sc}_{t,\Sigma}$ où ν_t est la viscosité turbulente et $\mathrm{Sc}_{t,\Sigma}$ un nombre de Schmidt turbulent. La relation (3.26) constitue une forme très répandue de l'équation de transport de la densité d'aire interfaciale. La modélisation des termes sources décrivant la production et la destruction de Σ est en revanche un sujet beaucoup plus ouvert. Elle dépend en premier lieu du choix des phénomènes physiques à prendre en compte. Plusieurs expressions différentes pour ces termes ont ainsi été proposées dans la littérature. La section suivante détaille certaines d'entre elles.

Modélisation des termes de production et destruction : travaux de Vallet et Borghi

La première application du formalisme de la densité d'aire interfaciale pour modéliser l'atomisation primaire d'un jet liquide turbulent est due à VALLET et al. [275] (voir également les références VALLET [274] et VALLET et BORGHI [276]). Le formalisme LHF [8] est utilisé pour décrire le mélange diphasique en aval d'un injecteur Diesel. Les auteurs supposent que l'écoulement est à grand nombre de Reynolds et à grand nombre de Weber. La tension de

7. L'année de publication indiquée dans la référence ISHII [144] correspond à la seconde édition de l'ouvrage.
8. C'est-à-dire le formalisme "4 équations", mais en réalité avec seulement 3 équations, puisqu'ils n'utilisent pas d'équation sur l'énergie.

surface et la viscosité n'ont donc pas d'influence à grande échelle, mais agissent seulement à petite échelle. Leurs équations sont moyennées selon le formalisme RANS, et une attention particulière est portée à la fermeture des flux de diffusion turbulents, que ce soit pour l'équation sur la masse de liquide ou pour la quantité de mouvement. Ils n'utilisent pas, en effet, de simples fermetures algébriques (ni loi en gradient, ni hypothèse de Boussinesq) mais des équations de transport pour les flux turbulents non fermés, en plus des équations de transport classiques pour l'énergie cinétique turbulente k et sa dissipation ϵ (cf. § 5.4.4).

Concernant les termes sources de l'équation sur $\overline{\Sigma}$, ces auteurs considèrent que le terme de production doit rendre compte de l'effet de la turbulence. Celle-ci plisse l'interface et par conséquent conduit à une augmentation de $\overline{\Sigma}$. Ils séparent alors le terme de production en deux contributions différentes de la turbulence :

$$\mathcal{P}_\Sigma = \overline{\Sigma}(A + a)\,. \tag{3.29}$$

Les deux termes A et a ont la dimension inverse d'un temps et s'expriment donc en s^{-1}. Le terme A caractérise la production de turbulence par les grandes échelles :

$$A \propto \frac{\widetilde{\boldsymbol{u}''\boldsymbol{u}''} \cdot \nabla \widetilde{\boldsymbol{u}}}{k} = \frac{\mathcal{P}_k}{k}\,. \tag{3.30}$$

En effet, $\mathcal{P}_k$ n'est rien d'autre que le terme de production de l'énergie cinétique turbulente dans sa propre équation de transport (JONES et LAUNDER [153]). Le terme a représente l'effet des petites échelles de la turbulence, il est exprimé en fonction de l'énergie cinétique turbulente et de sa dissipation :

$$a \propto \frac{\epsilon}{k}\,. \tag{3.31}$$

En outre, VALLET et al. [275] expriment le terme de destruction comme

$$\mathcal{D}_\Sigma \propto -V_s \overline{\Sigma}^2\,. \tag{3.32}$$

L'expression de V_s est obtenue en supposant qu'il existe un équilibre aux petites échelles entre la turbulence et la tension de surface, qui fixe la taille moyenne des plus petites gouttes stables. Notons d_{eq} le diamètre de celles-ci, et $\overline{\Sigma}_{eq}$ la densité d'aire interfaciale correspondante. A partir du moment où l'on fait l'hypothèse que la phase liquide est sous forme de gouttes, ces deux grandeurs sont reliées l'une à l'autre via la fraction volumique de liquide α_l :

$$\overline{\Sigma}_{eq} = \frac{6\alpha_l}{d_{eq}}\,. \tag{3.33}$$

En notant $\overline{\rho}$ la masse volumique moyenne du mélange diphasique, $\widetilde{Y}_l$ la fraction massique de la phase liquide et ρ_l sa masse volumique, la fraction volumique α_l est définie ici par

$$\alpha_l = \frac{\overline{\rho}\widetilde{Y}_l}{\rho_l}\,. \tag{3.34}$$

Notons au passage que le diamètre d_{eq} est un diamètre moyen de Sauter, souvent noté d_{32}, puisqu'il représente le rapport entre le volume total des gouttes contenues dans une maille et leur surface. L'équilibre entre la turbulence et la tension de surface est atteint loin de l'injecteur, là ou la production d'énergie turbulente est nulle ($A = 0$) et le terme de production aux petites échelles équilibre le terme de destruction, ce qui implique :

$$a\overline{\Sigma}_{eq} = V_s \overline{\Sigma}_{eq}^2\,. \tag{3.35}$$

Il vient donc $V_s = a/\overline{\Sigma}_{eq} = a\, d_{eq}/(6\alpha_l)$, et il reste à déterminer l'expression du diamètre d'équilibre d_{eq} pour fermer le modèle. Pour cela, le raisonnement est basé sur une analogie avec la théorie de la turbulence de KOLMOGOROV [160]. Selon ce dernier, il existe une échelle de longueur η_K, l'échelle de Kolmogorov, pour laquelle les forces visqueuses équilibrent les forces d'inertie. Autrement exprimé, le nombre de Reynolds construit sur l'échelle de Kolmogorov est de l'ordre de l'unité.

En appliquant le même raisonnement à un écoulement diphasique turbulent, VALLET et al. [275] postulent qu'il existe une échelle de longueur pour le liquide telle que la tension de surface équilibre les forces d'inertie. Cette échelle de longueur représente donc le diamètre d'équilibre d_{eq} pour les plus petites gouttes. En poursuivant l'analogie, il s'ensuit que le nombre de Weber construit sur ce diamètre d'équilibre est de l'ordre de l'unité. La signification physique de cette hypothèse est la suivante : des gouttes plus petites que ce diamètre d'équilibre n'auraient d'autre choix, en moyenne, que de coalescer. Au contraire, des gouttes au diamètre supérieur à ce diamètre d'équilibre n'auraient d'autre choix que de se fragmenter sous l'effet de l'agitation turbulente environnante. Notant l_t

l'échelle intégrale de la turbulence et σ la tension de surface, ils proposent finalement l'expression suivante pour le diamètre d'équilibre d_{eq} :

$$d_{eq} \propto \frac{\sigma^{3/5} l_t^{2/5}}{k^{3/5}} \frac{\left(\overline{\rho}\widetilde{Y}_l\right)^{2/15}}{\rho_l^{11/15}} . \tag{3.36}$$

Enfin, il faut noter que l'utilisation du symbole $\propto$ dans les relations précédentes traduit la présence de constantes. VALLET et al. [275] proposent des valeurs pour ces constantes, en comparant les résultats de simulations avec des données expérimentales obtenues sur des configurations typiques d'injecteurs Diesel.

Travaux de Jay et application à la combustion cryotechnique

Le modèle de VALLET et al. [275] a été repris ensuite par plusieurs auteurs, notamment par POUROUCHOTTAMANE [218] et MEYERS [194] qui l'ont appliqué au domaine de la combustion cryotechnique. C'est également le cas de JAY [148] (voir également JAY et al. [149]), celui-ci proposant par ailleurs une modélisation différente des termes de production et de destruction. Précisément, il considère un terme $\mathcal{D}_{\Sigma,vap}$ de diminution d'interface due à l'évaporation, ainsi que deux termes de production : $\mathcal{P}_{\Sigma,1}$ caractérise la zone d'atomisation primaire du jet liquide et $\mathcal{P}_{\Sigma,2}$ représente la zone de fragmentation secondaire. Si l'on se réfère aux notations de la relation (3.26), nous avons donc $\mathcal{P}_\Sigma = \mathcal{P}_{\Sigma,1} + \mathcal{P}_{\Sigma,2}$, et $\mathcal{D}_\Sigma = \mathcal{D}_{\Sigma,vap}$. La modélisation proposée par JAY [148] pour ces trois termes est la suivante :

– L'expression du terme de production d'interface dans la zone d'atomisation primaire provient de la théorie linéaire des instabilités, appliquée à l'atomisation aérodynamique des jets coaxiaux (cf. § 2.3) :

$$\mathcal{P}_{\Sigma,1} \propto \dot{S}\overline{\Sigma}\left[1 - \left(\frac{\overline{\Sigma}}{\Sigma_f}\right)\right]^{1/2} h\left(1 - \frac{\overline{\Sigma}}{\Sigma_f}\right) . \tag{3.37}$$

Dans cette relation, $h(\bullet)$ désigne la fonction de Heaviside et $\dot{S}$ caractérise le taux de croissance de l'instabilité interfaciale. Celui-ci est relié au différentiel de vitesse entre les phases, information qui n'est a priori pas disponible puisque JAY [148] utilise une formulation LHF des équations diphasiques. Ce problème est néanmoins traité en introduisant un modèle algébrique pour le différentiel de vitesse, de type "flux de dérive". De plus, Σ_f désigne la valeur maximale de la densité d'aire interfaciale, atteinte lorsque les instabilités interfaciales sont saturées par des processus non-linéaires. Elle est reliée à Σ_i, la quantité initiale d'aire interfaciale (dont l'évaluation est loin d'être triviale, cf. § "Problématique de l'initialisation" ci-dessous), au rapport J des flux de quantités de mouvement à l'injection, et à l'épaisseur de vorticité δ dans le jet gazeux. On retrouve ici des notions déjà évoquées en § 2.3.2.

– Le terme de production de l'interface dû à la fragmentation secondaire ne doit s'appliquer, par définition, que dans une zone de l'écoulement où l'on suppose que la phase liquide se trouve sous forme dispersée. Le critère discriminant peut être défini par exemple par un niveau seuil de la fraction volumique de liquide. L'expression de ce terme est alors :

$$\mathcal{P}_{\Sigma,2} \propto h(r - r_c) \frac{\overline{\Sigma}}{\tau_{bu}} , \tag{3.38}$$

où $h(\bullet)$ désigne de nouveau la fonction de Heaviside, r est le rayon local des gouttes, r_c est le rayon critique et τ_{bu} le temps de rupture. Ces deux derniers termes sont obtenus en appliquant des modèles de fragmentation secondaire classiques, basés sur la comparaison entre le nombre de Weber local et un nombre de Weber critique (cf. § 7.2.1). Encore une fois, le calcul d'un nombre de Weber local nécessite la connaissance du différentiel de vitesse entre les phases, information qui ne peut être estimée dans un contexte LHF qu'en utilisant un modèle algébrique dédié, comme le fait JAY [148].

– Le terme de destruction de l'interface lié à l'évaporation s'exprime

$$\mathcal{D}_{\Sigma,vap} = -\frac{\beta_v}{36} \frac{\overline{\Sigma}^3}{\alpha_l^2} . \tag{3.39}$$

Dans cette expression, β_v regroupe toute la modélisation sur le processus d'évaporation de gouttes (cf. § 7.2.2), les autres termes permettent simplement de faire la conversion géométrique entre la densité d'aire interfaciale et le rayon des gouttes.

Travaux du CORIA

La modélisation des termes sources de l'équation sur la densité d'aire interfaciale a également bénéficié de travaux menés au CORIA ces dernières années. Les applications visées par les équipes du CORIA concernent

les jets libres issus des injecteurs Diesel, et non pas les jets assistés issus des injecteurs coaxiaux cryotechniques. Les modèles qu'ils ont proposés sont donc davantage inspirés des travaux de VALLET et al. [275] que de ceux de JAY et al. [149]. Ainsi, BEAU [18] et DEMOULIN et al. [58] reprennent la stratégie initiée par VALLET et al. [275] : les équations utilisées pour décrire l'écoulement diphasique correspondent aux formalismes LHF et RANS, et sont associées à une équation de transport de l'aire interfaciale. A la suite des travaux précédents, LEBAS [174] (voir également LEBAS et al. [173]) introduit une fonction de pondération des différents termes sources. Celle-ci permet d'opérer la transition progressive entre les termes sources qui s'appliquent plutôt dans la zone dense de l'écoulement (atomisation primaire sous l'effet de la turbulence), et ceux qui s'appliquent plutôt dans la zone dispersée (coalescence et fragmentation secondaire).

Par ailleurs, BEAU [18] est semble-t-il parmi les premiers à proposer de coupler l'équation sur l'aire interfaciale avec une description lagrangienne des gouttes. Il définit un critère de transition qui permettrait de passer d'une description eulérienne dans la zone dense de l'atomisation, où l'équation sur la densité d'aire interfaciale est bien adaptée, à une description lagrangienne dans la zone où la phase liquide est dispersée. L'approche lagrangienne présente le grand avantage de pouvoir rendre compte de la polydispersion des gouttes, ce que ne fait pas, localement (à l'échelle d'une cellule du maillage eulérien), l'équation sur l'aire interfaciale. En effet, comme nous l'avons vu précédemment, un unique diamètre moyen de Sauter est fixé par la donnée conjointe de α_l et de $\overline{\Sigma}$. Le modèle développé dans la thèse de BEAU [18] est d'ailleurs nommé ELSA pour Eulerian Lagrangian Spray Atomization. Cette idée de coupler les descriptions eulérienne et lagrangienne a été reprise ensuite dans la thèse de LEBAS [174]. Cela dit, que ce soit dans la thèse de BEAU [18] ou dans celle de LEBAS [174], il est difficile de conclure sur le niveau de maturité exact de la démarche. Et ce d'autant plus qu'il n'est pas fait mention du couplage eulérien-lagrangien dans la publication LEBAS et al. [173], successive à la thèse de LEBAS [174].

Enfin, CHESNEL [42] (voir également CHESNEL et al. [40]) propose une autre version de l'équation sur la densité d'aire interfaciale, spécialement dédiée à la LES (cf. § 3.2.3). Dans ce contexte, il procède alors différemment, et postule que la densité d'aire interfaciale est la somme d'une valeur minimale Σ_{min} et d'une fluctuation de sous-maille Σ' :

$$\Sigma = \Sigma_{min} + \Sigma' \,. \tag{3.40}$$

La valeur minimale est fonction de la fraction volumique locale, et est basée sur des considérations géométriques (cf. § "Problématique de l'initialisation" ci-dessous). C'est alors sur la fluctuation de sous-maille Σ' que porte l'équation de transport, et non plus sur la densité d'aire interfaciale totale. Les termes sources classiques vus précédemment sont adaptés pour traduire ce changement. Ils sont aussi adaptés au formalisme de la LES : l'évaluation de l'énergie cinétique turbulente n'est pas la même que dans le cadre RANS, par exemple. Enfin, un certain nombre de constantes apparaissent dans l'équation sur la densité d'aire interfaciale. Ces constantes sont régulièrement affinées grâce à des simulations numériques directes (DNS), réalisées spécialement dans le but d'enrichir la modélisation des termes sources de l'équation sur la densité d'aire interfaciale (DEMOULIN et al. [59], DURET et al. [81]).

Problématique de l'initialisation

Si la modélisation des termes sources est un sujet complexe, la question de l'initialisation de la densité d'aire interfaciale se pose également. Dans les travaux de VALLET et al. [275], Σ est initialisée dans les mailles situées immédiatement en aval des lèvres de l'injecteur en prenant l'inverse du diamètre de la maille. L'interface est donc supposée plane à cet endroit. Ils précisent cependant que l'initialisation a généralement peu d'influence sur la suite du calcul, les termes de production ayant rapidement une contribution majeure. Par la suite, BEAU [18] est le premier à proposer un terme supplémentaire dans son équation de transport, spécifiquement dédié à l'initialisation. Il s'agit de modéliser la production minimale d'interface induite par le mélange turbulent liquide-gaz. Ce terme est repris par LEBAS et al. [173] ensuite, tandis que CHESNEL et al. [40] procèdent encore différemment, comme on l'a vu, en décomposant Σ en une partie minimale et une fluctuation. La partie minimale est alors en quelque sorte un terme d'initialisation, qui s'exprime selon CHESNEL et al. [40] comme

$$\Sigma_{min} = C_0 \frac{\sqrt{\alpha_l (1-\alpha_l)}}{\Delta} \,, \tag{3.41}$$

où C_0 est une constante, α_l est la fraction volumique de liquide et Δ est la taille du filtre LES, c'est-à-dire la taille de la maille de calcul en pratique.

3.4 Modèles cinétiques pour la phase dispersée

Comme nous l'avons brièvement expliqué en § 3.1, il est préférable d'adopter une approche spécifique pour décrire la phase dispersée. Par définition, celle-ci est composée d'inclusions qui peuvent être considérées sphériques

et ponctuelles. De plus, la distance moyenne qui sépare deux inclusions est généralement très grande devant les distances moléculaires. Ces observations permettent d'adopter une approche statistique, abandonnant ainsi la vision de la mécanique des milieux continus et les équations de Navier-Stokes. Plus formellement, la validité de cette hypothèse dépend du nombre de Knudsen. Dans le contexte d'un écoulement gazeux, ce nombre adimensionnel est défini comme

$$\mathrm{Kn} = \frac{\lambda}{L} = \frac{\tau}{T}\,, \tag{3.42}$$

où λ et τ désignent respectivement le libre parcours moyen des molécules du gaz et le temps caractéristique de collision associé, tandis que L désigne une échelle spatiale caractéristique et T un temps associé. Le cas $\mathrm{Kn} \ll 1$ est celui d'un écoulement fluide, continu, correctement décrit par les équations de Navier-Stokes. En revanche, des valeurs du nombre de Knudsen de l'ordre de l'unité, ou supérieures à l'unité, indiquent que l'hypothèse de milieu continu n'est plus valable et qu'il est nécessaire d'adopter une description statistique.

De manière analogue, il est possible de définir un nombre de Knudsen pour la phase dispersée à partir du libre parcours moyen (ou du temps caractéristique de collision associé) des particules qui la composent. Ainsi, plus la phase dispersée est effectivement dispersée (et donc plus le libre parcours moyen des particules est grand), plus le nombre de Knudsen est important, et donc plus l'approche statistique est justifiée. En théorie cinétique des gaz, le cas limite $\mathrm{Kn} \gg 1$ caractérise un écoulement moléculaire libre (on parle aussi de gaz raréfiés), décrit par le formalisme de l'équation de Maxwell-Boltzmann. Le comportement des particules sous l'hypothèse de phase dispersée est régi par une équation semblable à l'équation de Maxwell-Boltzmann. Il s'agit de l'équation cinétique dite de Williams-Boltzmann.

3.4.1 L'équation cinétique de Williams-Boltzmann

L'équation cinétique de Williams-Boltzmann (WILLIAMS [300]) décrit l'évolution de la fonction densité de probabilité du nombre de gouttes par unité de volume, ou *number density function* (NDF). La NDF est une fonction de plusieurs variables, dont le choix dépend de la nature physique des écoulements à traiter. Typiquement, dans le domaine des écoulements diphasiques réactifs, il s'agit des variables de temps t, de position $\boldsymbol{x}$, de vitesse $\boldsymbol{v}$, de taille s (diamètre, surface ou volume) et de température θ[9]. La NDF est notée par conséquent $f(t, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}, s, \theta)$, et l'expression mathématique $f(t, \boldsymbol{x}, s, \boldsymbol{v}, \theta)\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}\,\mathrm{d}s\,\mathrm{d}\boldsymbol{v}\,\mathrm{d}\theta$ représente le nombre de particules situées dans le volume $d\boldsymbol{x}$ au voisinage du point $\boldsymbol{x}$ à l'instant t, dont la taille est comprise entre s et $s + ds$, et ayant une vitesse et une température respectivement comprises entre v et $v + dv$, et entre θ et $\theta + d\theta$.

L'équation cinétique est obtenue en explicitant l'équation bilan $df = 0$ (théorème de Liouville), vérifiée lorsque f est constante dans un volume de contrôle. En réalité, le nombre de gouttes n'est pas toujours conservé à l'intérieur d'un volume de contrôle. Des gouttes peuvent être créées par fragmentation, ou au contraire éliminées par coalescence. On ajoute ainsi à l'équation de bilan des termes sources, notés respectivement Γ et Q. Dans ces conditions, l'équation cinétique s'écrit de la manière suivante :

$$\boxed{\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_{\boldsymbol{x}} \cdot (\boldsymbol{v} f) + \nabla_{\boldsymbol{v}} \cdot (\mathcal{F} f) + \frac{\partial}{\partial s}(\mathcal{K} f) + \frac{\partial}{\partial \theta}(\mathcal{R} f) = \Gamma + Q} \tag{3.43}$$

L'opérateur $\nabla_{\boldsymbol{x}}$ désigne la divergence dans l'espace physique, tandis que l'opérateur $\nabla_{\boldsymbol{v}}$ représente la divergence dans l'espace des vitesses. D'un point de vue physique, chaque terme de l'équation correspond à un phénomène pouvant influer sur la NDF, à savoir :

- le transport des gouttes : $\dfrac{\partial f}{\partial t} + \nabla_{\boldsymbol{x}} \cdot (\boldsymbol{v} f)$.
- les forces extérieures. Dans le cas de gouttes liquides portées par une phase gazeuse (fort rapport de densité), la force de traînée est généralement considérée prépondérante. Sous cette hypothèse, $\mathcal{F} = \dfrac{d\boldsymbol{v}}{dt}$ désigne le vecteur de la force de traînée massique, exprimée en N/kg ou de manière équivalente en $\mathrm{m.s^{-2}}$.
- les transferts de masse avec la phase porteuse (évaporation et condensation), impliquant une variation de la taille des gouttes : $\mathcal{K} = \dfrac{\mathrm{d}\,s}{\mathrm{d}\,t}$. Ce terme a la dimension de la variable taille divisée par un temps : [s]/[T]. Si la variable taille désigne le diamètre, la surface ou le volume d'une goutte, alors $\mathcal{K}$ s'exprime respectivement en $\mathrm{m.s^{-1}}$, $\mathrm{m^2.s^{-1}}$ ou $\mathrm{m^3.s^{-1}}$.

9. On suppose donc ici que la température à l'intérieur des particules est uniforme, ce qui revient à supposer une conductivité thermique infinie. Il est cependant possible d'ajouter une modélisation de la conduction thermique. On résout pour cela l'équation de la chaleur en coordonnées sphériques, après avoir discrétisé les particules en plusieurs couches. C'est par exemple la méthode disponible dans le solveur eulérien SPIREE du code CEDRE.

– les transferts de chaleur avec la phase porteuse, induisant une variation de température : $\mathcal{R} = \dfrac{d\theta}{dt}$ en K.s^{-1}.

– la fragmentation et la coalescence : Γ et Q.

Les termes $\mathcal{F}$, $\mathcal{K}$ et $\mathcal{R}$ caractérisent les interactions des particules avec la phase porteuse. Ils dépendent *a priori* de toutes les variables du problème $(t, \boldsymbol{x}, s, \boldsymbol{v}, \theta)$, ainsi que des propriétés de la phase gazeuse (composition chimique, vitesse, pression, température). Leur modélisation repose sur des lois de comportement établies pour des gouttes isolées (cf. § 7.1). En pratique, la résolution numérique de l'équation cinétique peut être abordée selon trois approches différentes, exposées ci-dessous.

3.4.2 Les différentes approches pour la résolution de l'équation cinétique

Méthode Full Spray

La méthode la plus immédiate est la méthode Full Spray, qui consiste simplement à résoudre l'équation cinétique en procédant à une discrétisation totale de l'espace des phases, c'est-à-dire de l'ensemble des variables $(t, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}, s, \theta)$ dont dépend la NDF f. En considérant l'unique dimension temporelle, les trois dimensions de l'espace physique, les trois dimensions de l'espace des vitesses, et l'unique dimension de l'espace des tailles et de l'espace des températures, nous obtenons un espace des phases à neuf dimensions. L'application de la méthode Full Spray se révèle donc extrêmement coûteuse et ainsi inenvisageable dans la plupart des cas pratiques. Elle a cependant pu être appliquée à des cas purement académiques (O'ROURKE [204]).

Méthodes lagrangiennes

En dehors de la méthode Full Spray, une autre approche largement répandue pour décrire l'évolution d'un spray est celle des méthodes lagrangiennes. Dans ce contexte, la manière la plus immédiate de procéder consisterait à opérer un suivi lagrangien de chaque goutte, en résolvant les équations différentielles ordinaires qui régissent l'évolution de ses grandeurs physiques (position, quantité de mouvement, taille, température). Néanmoins, cette approche, nommée ***DPS*** pour ***Discrete Particle Simulation***, se révèlerait encore une fois beaucoup trop coûteuse en temps de calcul.

C'est pourquoi, en pratique, les méthodes lagrangiennes calculent l'évolution de ***particules numériques***. Une particule numérique regroupe un certain nombre de particules physiques réelles, considérées comme ayant globalement les mêmes positions, vitesses, tailles et températures à chaque instant. Des équations d'évolution sont résolues pour chaque particule numérique, ce qui revient à résoudre l'équation cinétique (3.43) après voir écrit la NDF f comme une somme de fonctions diracs :

$$f\,(t, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}, s, \theta) = \sum_{i=1}^{N} \omega_i(t)\delta_{x=x_i(t)}\delta_{v=v_i(t)}\delta_{s=s_i(t)}\delta_{\theta=\theta_i(t)}\,. \tag{3.44}$$

En plus des variables $(t, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}, s, \theta)$, chaque particule numérique est décrite par une variable supplémentaire, le poids numérique $\omega_i(t)$. Il désigne le nombre réel de gouttes incluses dans la particule numérique à l'instant t. Les méthodes lagrangiennes permettent de prendre en compte les phénomènes de coalescence et de fragmentation, grâce à l'utilisation d'algorithmes de Monte-Carlo (DUKOWICZ [79], O'ROURKE [204], RUGER et al. [232]).

L'utilisation de méthodes lagrangiennes pour décrire la phase dispersée est une pratique très répandue dans le domaine de la propulsion, qu'elle soit spatiale ou aéronautique. Dans le cadre de la propulsion cryotechnique notamment, la méthode SEL (Statistique Eulérien Lagrangien) repose sur un couplage entre une description lagrangienne des gouttes d'oxygène liquide et une description eulérienne classique de la phase gazeuse. Cette méthode n'est pas capable de décrire le phénomène d'atomisation primaire qui se produit dans la zone dense de l'écoulement liquide et qui est à l'origine de la formation des gouttes. Certains travaux ont néanmoins cherché à améliorer la description de la zone dense dans cette approche. POUROUCHOTTAMANE [218], par exemple, propose de prendre en compte des particules à la géométrie non sphérique, caractéristique des ligaments. Il introduit également la fraction volumique de liquide dans la partie convective des équations de la phase gazeuse, alors que celles-ci ne sont généralement couplées au spray que par l'intermédiaire des termes sources.

Toujours dans le registre des méthodes lagrangiennes appliquées à l'atomisation des jets liquides, les travaux de GOROKHOVSKI [113] et APTE et al. [7] adoptent une démarche originale. L'approche lagrangienne n'est pas limitée au suivi des gouttes dans la zone de l'écoulement où l'on trouve effectivement des gouttes, elle est utilisée pour modéliser la phase liquide dès la sortie de l'injecteur. Le jet liquide est ainsi représenté sous la forme d'une injection successive de "grosses" gouttes dont le diamètre initial est celui de l'injecteur. L'atomisation primaire est alors vue comme une succession de fragmentations des gouttes mères et de leurs descendantes, résultant de l'effet de la turbulence de la phase gazeuse. Des modèles stochastiques basés sur l'analyse de Kolmogorov (GOROKHOVSKI et

SAVELIEV [112]) sont utilisés pour décrire la dynamique des fragmentations. Les fragmentations s'arrêtent lorsque la taille des gouttes atteint une valeur critique, conditionnée par l'équilibre entre le niveau de turbulence et la tension de surface. Ces méthodes proposent donc une description complète de l'atomisation des jets liquides turbulents, depuis l'injection jusqu'aux plus petites gouttes. Elles permettent de prédire correctement les propriétés globales de l'atomisation, en termes de longueur de coeur liquide et de tailles moyennes des gouttes. Cette description a néanmoins ses limites dans la mesure où elle néglige absolument tous les détails de la dynamique de l'interface (GOROKHOVSKI et HERRMANN [114]).

Méthodes eulériennes

Les méthodes eulériennes décrivent l'évolution des particules via la résolution d'équations de transport pour des grandeurs moyennes, représentant des moments de la NDF. Il ne s'agit donc pas de suivre des particules individuelles dans leur mouvement, ni même des groupes de particules. Ces méthodes sont celles qui nous intéressent plus particulièrement dans cette étude, aussi elles sont présentées en détail en § 3.4.3.

Avantages et inconvénients des méthodes lagrangiennes et eulériennes

Le Tableau 3.4 présente les avantages et inconvénients respectifs des méthodes lagrangiennes et eulériennes. Le choix d'une méthode par rapport à l'autre dépend généralement du rapport coût / précision recherché, des phénomènes que l'on souhaite modéliser, ou encore du type de couplage existant entre la phase dispersée et la phase porteuse.

MÉTHODES LAGRANGIENNES	MÉTHODES EULÉRIENNES
AVANTAGES	
√ Traitement naturel des modèles à l'échelle de la goutte. √ Traitement naturel des trajectoires (croisement, rebond).	√ Couplage naturel avec la phase porteuse (décrite par le formalisme eulérien). √ Facilité de mise en œuvre sur des calculateurs parallèles.
INCONVÉNIENTS	
× Coût élevé si besoin de suivre un grand nombre de particules (3D polydisperse). × Couplage délicat avec la phase porteuse (projection des termes sources ponctuels sur la grille eulérienne). × Suivi des particules en calcul parallèle. × Équilibrage de la charge en calcul parallèle.	× Complexité des modèles et des méthodes numériques lorsque l'on veut augmenter le niveau de précision (polydispersion). × Problèmes possibles avec les schémas numériques pour la partie convective des équations (hyperbolicité faible, δ-chocs).

TABLEAU 3.4 – ***Avantages et inconvénients des méthodes lagrangiennes et eulériennes.***

Problématique des conditions initiales du spray

Nous nous intéressons dans cette étude aux sprays issus de l'atomisation des jets liquides. Il est clair que l'approche statistique ne permet pas de décrire la zone dense où le jet liquide est atomisé, et ne peut donc pas fournir les propriétés initiales des gouttes. Aussi, lorsque ce type d'approche est utilisé seul, que ce soit via des méthodes lagrangiennes ou eulériennes, les conditions initiales et limites des gouttes doivent être présumées d'une manière ou d'une autre. Premièrement, il s'agit de déterminer leur position. En effet, la géométrie du calcul est généralement agrémentée d'une condition limite artificielle censée représenter la localisation moyenne du cœur liquide d'où les gouttes sont atomisées (POUROUCHOTTAMANE et al. [219]). Deuxièmement, il s'agit de déterminer leur diamètre, vitesse, température et taux de présence (fraction volumique). Il existe alors deux possibilités pour obtenir ces données :

(i) on utilise des données expérimentales pour l'application visée, s'il en existe.

(ii) on utilise des corrélations qui fournissent les propriétés moyennes des gouttes issues de l'atomisation primaire en fonction des conditions d'injection et de la géométrie de l'injecteur. Malheureusement, ces corrélations

ont très souvent été établies pour le cas spécifique des jets libres (voir la revue de DOS SANTOS et LE MOYNE [72]). C'est le cas des corrélations de HIROYASU et ARAI [138] et ELKOTB [85], établies à partir de données expérimentales et qui fournissent le diamètre moyen de Sauter (SMD) en fonction des propriétés physiques et de certains nombres adimensionnels. Le modèle WAVE (REITZ et DIWAKAR [228]) fournit également la valeur moyenne du SMD en fonction des conditions d'injection pour les jets libres, mais cette fois en utilisant l'analyse théorique de stabilité linéaire, présentée au Chapitre 2.

Notons que l'objectif principal de notre étude est de parvenir à mettre en place un couplage des méthodes statistiques dédiées aux sprays avec une description du jet liquide originel. L'un des avantages attendus de cette démarche est justement de s'épargner la question des conditions initiales des gouttes.

3.4.3 Présentation détaillée des méthodes eulériennes

Les méthodes eulériennes visent une réduction de l'espace des phases (c'est-à-dire une diminution du nombre de degrés de liberté dans l'équation cinétique (3.43)) en ***établissant des équations de transport pour certains moments de la NDF***. On rappelle que le moment statistique $\mathcal{M}_k$ d'ordre k d'une fonction quelconque à une variable $\varphi(t)$ est défini par

$$\mathcal{M}_k = \int_t t^k \varphi(t)\,\mathrm{d}t\,. \tag{3.45}$$

Dans le cas de la NDF $f\,(t, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}, s, \theta)$, qui est une fonction à plusieurs variables, on désigne par $\mathcal{M}_{i,j,k,l,m}$ le moment d'ordre (i, j, k) en vitesse (trois composantes v_x, v_y, v_z), d'ordre l en taille et d'ordre m en température. Il est défini par la relation :

$$\mathcal{M}_{i,j,k,l,m} = \int_{v_x}\int_{v_y}\int_{v_z}\int_s\int_\theta v_x^i v_y^j v_z^k s^l \theta^m f\,(t, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}, s, \theta)\;\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}s\,\mathrm{d}v_z\,\mathrm{d}v_y\,\mathrm{d}v_x\,. \tag{3.46}$$

Une équation de transport pour un moment $\mathcal{M}_{i,j,k,l,m}$ de la NDF peut ainsi être obtenue en intégrant l'équation cinétique (3.43) de la manière suivante :

$$\int_{v_x}\int_{v_y}\int_{v_z}\int_s\int_\theta v_x^i v_y^j v_z^k s^l \theta^m \,\text{Eq. (3.43)}\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}s\,\mathrm{d}v_z\,\mathrm{d}v_y\,\mathrm{d}v_x\,. \tag{3.47}$$

Cette procédure introduit toutefois une perte d'information à moins de connaitre une infinité de moments (SIBRA [251]). En effet, un système d'équations portant sur un nombre fini de moments n'est pas fermé, dans la mesure où l'équation pour un moment d'ordre n fait intervenir des moments d'ordre $n+1$. Des hypothèses sur la forme de la NDF doivent être formulées de manière à exprimer les moments d'ordre supérieur et ainsi fermer le système des moments. Deux catégories de méthodes existent pour y parvenir. Dans la première catégorie, la procédure de fermeture s'effectue en deux étapes successives :

(i) Les distributions en vitesse et en température, conditionnées par la taille, sont d'abord présumées. Ceci permet d'établir un premier système d'équations de conservation à un niveau intermédiaire, nommé ***semi-cinétique***, où l'espace des tailles a été préservé (LAURENT et MASSOT [167]).

(ii) Dans une seconde étape, un traitement de la variable taille permet d'aboutir au système d'équations de conservation qui constitue le modèle final.

La seconde catégorie de méthodes permettant d'obtenir la fermeture du système des moments passe par l'utilisation de techniques de quadrature. La dérivation à partir de l'équation cinétique se fait en une seule étape, sans passer par le niveau semi-cinétique. Parmi les méthodes de la littérature qui entrent dans cette catégorie, on peut citer les méthodes QMOM (MCGRAW [190]), DQMOM (DESJARDINS et al. [61], Fox et al. [99]), CQMOM (YUAN et Fox [305]), EQMOM (YUAN et al. [306]) ou encore MG (VIÉ et al. [282]) [10]. En complément de ces références, le lecteur intéressé est invité à consulter EMRE [87], DOISNEAU [71], LAURENT et al. [168] ou Fox [100]. Nous ne donnerons pas ici plus de détails sur ces méthodes, et nous concentrons plutôt sur la première catégorie.

3.4.3.1 Etablissement d'un système d'équations de conservation au niveau semi-cinétique

Il s'agit donc d'établir en premier lieu un système d'équations de conservation à un niveau intermédiaire, dit ***semi-cinétique***. Cette étape passe par la formulation d'une hypothèse sur la forme de la NDF. En l'occurrence, l'hypothèse formulée par LAURENT et MASSOT [167] consiste à découpler les distributions en taille, vitesse et température, en écrivant :

$$f\,(t, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}, s, \theta) = \overline{n}\,(t, \boldsymbol{x}, s)\,\phi_{\boldsymbol{v}}(t, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}, s)\phi_\theta(t, \boldsymbol{x}, s, \theta)\,, \tag{3.48}$$

10. QMOM : Quadrature Method Of Moments, DQMOM : Direct Quadrature Method Of Moments, CQMOM : Conditional Quadrature Method of Moments, EQMOM : Extended Quadrature Method of Moments, MG : Multi Gaussian.

où $\phi_{\boldsymbol{v}}$ et ϕ_θ désignent respectivement les distributions en vitesse et en température, conditionnées par la taille. La grandeur $\overline{n}\,(t, \boldsymbol{x}, s)$ représente alors la densité en nombre de gouttes pour une taille s donnée. Elle s'obtient par intégration de la NDF sur les variables vitesse et température (moment d'ordre 0 en $\boldsymbol{v}$ et θ) :

$$\overline{n}\,(t, \boldsymbol{x}, s) = \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} f\,(t, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}, s, \theta)\,\mathrm{d}\boldsymbol{v}\,\mathrm{d}\theta\,. \tag{3.49}$$

A ce stade, il convient de choisir les moments de la NDF pour lesquels nous souhaitons établir des équations de transport. En pratique, les moments sont choisis de sorte qu'ils représentent des variables macroscopiques conservatives. De cette manière, les équations obtenues sont des équations de conservation similaires aux équations de conservation classiques en mécanique des fluides. Elles portent ici sur la densité en nombre de gouttes, la masse, la quantité de mouvement et l'énergie interne des particules [11]. Afin d'établir ces équations, commençons par introduire la masse d'une particule $m(s, \theta)$, telle que

$$m(s, \theta) = \rho_0(\theta)\tau(s)\,, \tag{3.50}$$

où ρ_0 est la masse volumique thermodynamique de la particule, supposée fonction uniquement de la température θ et $\tau(s)$ est le volume de la particule uniquement fonction de sa taille s [12]. De même, l'énergie interne massique d'une particule est supposée dépendre uniquement de la température (les effets de compressibilité sont négligés). Elle s'exprime donc

$$e(\theta) = c_p(\theta)\theta\,, \tag{3.51}$$

où $c_p(\theta)$ est la capacité calorifique massique de la particule. Établir les équations de conservation au niveau semi-cinétique sur la densité en nombre de gouttes, la masse, la quantité de mouvement et l'énergie interne, consiste alors à multiplier l'équation cinétique (3.43) respectivement par 1, la masse d'une particule $m(s, \theta)$, la quantité de mouvement d'une particule $m(s, \theta)\boldsymbol{v}$, et l'énergie interne d'une particule $m(s, \theta)e(\theta)$, et à intégrer à chaque fois l'équation obtenue sur la vitesse et la température. En d'autres termes, et en utilisant la relation (3.50), il s'agit de procéder aux opérations suivantes :

$$\begin{cases} \displaystyle\int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \text{Eq. (3.43)}\,\mathrm{d}\boldsymbol{v}\,\mathrm{d}\theta \\ \tau(s) \displaystyle\int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \text{Eq. (3.43)}\,\rho_0(\theta)\,\mathrm{d}\boldsymbol{v}\,\mathrm{d}\theta \\ \tau(s) \displaystyle\int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \text{Eq. (3.43)}\,\rho_0(\theta)\boldsymbol{v}\,\mathrm{d}\boldsymbol{v}\,\mathrm{d}\theta \\ \tau(s) \displaystyle\int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \text{Eq. (3.43)}\,\rho_0(\theta)e(\theta)\,\mathrm{d}\boldsymbol{v}\,\mathrm{d}\theta \end{cases} \tag{3.52}$$

Les détails calculatoires relatifs à cette procédure ne sont pas décrits ici, ils sont reportés en Annexe A. En procédant ainsi, le système semi-cinétique (3.53) est obtenu, les dépendances des différentes variables ayant été omises de manière à alléger les notations.

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \overline{n}}{\partial t} + \nabla\cdot(\overline{n}\,\overline{\boldsymbol{v}}) = \Gamma_1 + Q_1 - \dfrac{\partial}{\partial s}\left(\overline{n}\overline{\mathcal{K}}\right) \\ \dfrac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \nabla\cdot(\overline{\rho}\widetilde{\boldsymbol{v}}) = \Gamma_2 + Q_2 - \tau(s)\dfrac{\partial}{\partial s}\left(\dfrac{\overline{\rho}\widetilde{\mathcal{K}}}{\tau(s)}\right) + \tau(s)\Delta_\rho \\ \dfrac{\partial \overline{\rho}\widetilde{\boldsymbol{v}}}{\partial t} + \nabla\cdot(\overline{\rho}\widetilde{\boldsymbol{v}}\otimes\widetilde{\boldsymbol{v}} + \boldsymbol{P}) = \Gamma_3 + Q_3 - \tau(s)\dfrac{\partial}{\partial s}\left(\dfrac{\overline{\rho}\widetilde{\mathcal{K}\boldsymbol{v}}}{\tau(s)}\right) + \tau(s)\Delta_{\rho\boldsymbol{v}} + \overline{\rho}\widetilde{\mathcal{F}} \\ \dfrac{\partial \overline{\rho}\widetilde{e}}{\partial t} + \nabla\cdot(\overline{\rho}\widetilde{\boldsymbol{v}}\widetilde{e}) = \Gamma_4 + Q_4 - \tau(s)\dfrac{\partial}{\partial s}\left(\dfrac{\overline{\rho}\widetilde{\mathcal{K}e}}{\tau(s)}\right) + \tau(s)\Delta_{\rho e} + \overline{\rho}\widetilde{c_p\mathcal{R}} \end{cases} \tag{3.53}$$

Les définitions des moyennes $\overline{\bullet}$ et $\widetilde{\bullet}$ et des différents termes du système (3.53) sont également précisées en détail dans l'Annexe A. Apportons simplement ici quelques précisions :

11. En mécanique des fluides, l'équation sur l'énergie porte généralement plutôt sur l'énergie totale. Nous verrons en § 3.4.3.5 et en Annexe B qu'il est possible d'établir *a posteriori*, c'est-à-dire au niveau macroscopique après l'étape semi-cinétique, une équation sur l'énergie totale des particules. Il suffit pour cela de combiner l'équation sur l'énergie interne et une équation sur l'énergie cinétique obtenue à partir de celle sur la quantité de mouvement.

12. Sans présumer encore du choix de la variable taille, qui peut être le diamètre (ou le rayon), la surface ou le volume.

– Le système semi-cinétique tel qu'il est présenté dans la littérature (LAURENT et MASSOT [167]) est basé sur l'hypothèse d'une masse volumique ρ_0 et d'une capacité calorifique c_p indépendantes de la température. La prise en compte explicite de la dépendance en température dès le niveau semi-cinétique, comme nous l'avons fait ici, fait apparaitre des termes supplémentaires Δ_ρ, $\Delta_{\rho\boldsymbol{v}}$ et $\Delta_{\rho e}$. En toute rigueur, ces termes doivent ensuite se répercuter au niveau macroscopique [13]. Ils s'annulent dès lors que ρ_0 et c_p sont constants.

– Les grandeurs $\overline{\mathcal{K}}$, $\widetilde{\mathcal{K}}$, $\widetilde{\mathcal{K}\boldsymbol{v}}$, $\widetilde{\mathcal{K}e}$, $\widetilde{\mathcal{F}}$ et $\widetilde{c_p\mathcal{R}}$ désignent des valeurs moyennes (intégrées sur la vitesse et la température) des termes de variation de taille $\mathcal{K}$, de vitesse $\mathcal{F}$ et de température $\mathcal{R}$. De même, les grandeurs Γ_k et Q_k représentent les variations moyennes sur le nombre, la masse, la quantité de mouvement et l'énergie, dues aux phénomènes de fragmentation et de coalescence.

– Il est possible de faire apparaitre la fraction volumique moyenne au niveau semi-cinétique, produit de la densité en nombre et du volume d'une goutte, et qui s'exprime également comme le rapport des valeurs moyennes de la densité en masse $\overline{\rho}$ et de la masse volumique thermodynamique $\overline{\rho_0}$:

$$\overline{\alpha}\,(t,\boldsymbol{x},s) = \tau(s)\overline{n}\,(t,\boldsymbol{x},s) = \frac{\rho\,(t,\boldsymbol{x},s,\theta)}{\rho_0(\theta)} = \frac{\overline{\rho}\,(t,\boldsymbol{x},s)}{\overline{\rho_0}}\,, \tag{3.54}$$

$$\overline{\rho_0} = \int_\theta \rho_0(\theta)\,\phi_\theta\,d\theta\,. \tag{3.55}$$

– Le tenseur $\boldsymbol{P}$ caractérise la dispersion en vitesse des particules, il est l'équivalent d'un terme de pression. Son expression est la suivante :

$$\boldsymbol{P} = \int_\theta\int_{\boldsymbol{v}} \rho(\boldsymbol{v}-\widetilde{\boldsymbol{v}})\otimes(\boldsymbol{v}-\widetilde{\boldsymbol{v}})\,\phi_{\boldsymbol{v}}\phi_\theta\,d\boldsymbol{v}\,d\theta = \overline{\alpha}\int_\theta\int_{\boldsymbol{v}} \rho_0(\theta)(\boldsymbol{v}-\widetilde{\boldsymbol{v}})\otimes(\boldsymbol{v}-\widetilde{\boldsymbol{v}})\,\phi_{\boldsymbol{v}}\phi_\theta\,d\boldsymbol{v}\,d\theta\,. \tag{3.56}$$

Finalement, la formulation (3.53) du système semi-cinétique permet d'identifier précisément les deux étapes qui restent à effectuer avant d'obtenir le modèle final, et qui font l'objet des deux paragraphes suivants :

(i) présumer la forme des distributions en vitesse et température, $\phi_{\boldsymbol{v}}$ et ϕ_θ, dont dépendent à ce stade quasiment tous les termes du système semi-cinétique.

(ii) proposer une procédure de discrétisation de l'espace des tailles permettant de formuler les termes en $\partial/\partial s$.

3.4.3.2 Hypothèses pour les distributions en température et en vitesse au niveau semi-cinétique

En premier lieu, il convient donc de formuler des hypothèses sur la forme des distributions $\phi_{\boldsymbol{v}}$ et ϕ_θ, conditionnées par la taille s. En d'autres termes, il s'agit de dire comment se répartissent la vitesse et la température d'un ensemble de particules dont la taille est voisine de s, et qui sont situées à un instant t dans un même volume de contrôle autour du point $\boldsymbol{x}$. Dans le cas général, si l'on considère que la répartition locale des vitesses et températures des particules est le résultat de processus aléatoires, alors les distributions $\phi_{\boldsymbol{v}}$ et ϕ_θ peuvent être représentées par des lois de Gauss (ou lois normales) [14]. La fonction densité de probabilité de la loi de Gauss pour une variable aléatoire quelconque, d'espérance μ et d'écart-type σ, s'exprime :

$$f(\xi) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\xi-\mu}{\sigma}\right)^2\right]. \tag{3.57}$$

Ainsi, si l'on souhaite pouvoir reconstituer localement les distributions en vitesse et en température sous la forme de lois de Gauss, il est nécessaire :

– de transporter des moments d'ordre 1, reliés aux valeurs moyennes $\overline{\boldsymbol{v}}$ et $\overline{\theta}$, c'est-à-dire à l'espérance μ de la loi gaussienne,

– mais également de transporter des moments d'ordre 2, reliés à l'écart-type σ (ou la variance σ^2) de la loi gaussienne.

En pratique, le transport des moments d'ordre 2 peut s'avérer coûteux et poser des difficultés supplémentaires de modélisation. En particulier, les équations du système semi-cinétique (3.53) ne suffisent pas à reconstruire des distributions sous forme de gaussiennes, dans la mesure où elles incluent uniquement des moments d'ordre 1 en

13. A l'heure actuelle, ces termes ne sont pas intégrés dans le solveur SPIREE du code CEDRE (cf. Chapitre 6), bien qu'il soit possible de définir des propriétés thermodynamiques fonctions de la température. A terme, l'implémentation de ces termes dans SPIREE est souhaitable pour mieux appréhender les cas où la température est fortement variable.

14. Dans le cas de la vitesse, si les composantes v_x, v_y, v_z sont distribuées selon une loi de Gauss, la norme $\|\boldsymbol{v}\|$ est, elle, distribuée selon une loi du χ à 3 degrés de liberté. C'est précisément la loi de Maxwell-Boltzmann qui décrit la distribution des normes de vitesse moléculaires en théorie cinétique des gaz.

vitesse et en température (par l'intermédiaire de la quantité de mouvement et de l'énergie interne). Il faudrait donc ajouter au système semi-cinétique (3.53) des équations de transport pour des moments d'ordre 2. Si l'on veut éviter cela et s'en tenir au système semi-cinétique (3.53), il faut formuler l'hypothèse d'une dispersion nulle autour des valeurs moyennes [15] :

> Toutes les particules dont la taille est voisine de s et qui sont situées à un instant t dans un même volume de contrôle autour du point $\boldsymbol{x}$ sont supposées avoir la même vitesse $\overline{\boldsymbol{v}}$ et la même température $\overline{\theta}$.

Dans ce cas, $\phi_{\boldsymbol{v}}$ et ϕ_θ deviennent des distributions de Dirac [16] (cf. Figure 3.1) et la NDF, exprimée jusqu'alors par la relation (3.48), devient :

$$f\left(t,\boldsymbol{x},\boldsymbol{v},s,\theta\right)=\overline{n}\left(t,\boldsymbol{x},s\right)\delta\Big[\boldsymbol{v}-\overline{\boldsymbol{v}}\left(t,\boldsymbol{x},s\right)\Big]\delta\Big[\theta-\overline{\theta}\left(t,\boldsymbol{x},s\right)\Big]\,. \tag{3.58}$$

De plus, la masse volumique thermodynamique moyenne $\overline{\rho_0}$, exprimée par la relation (3.55), devient :

$$\overline{\rho_0}=\rho_0(\overline{\theta})\,. \tag{3.59}$$

Dès lors, par souci de simplification, il est commode de noter simplement ρ_0 tel que :

$$\boxed{\rho_0=\overline{\rho_0}=\rho_0(\overline{\theta})\,.} \tag{3.60}$$

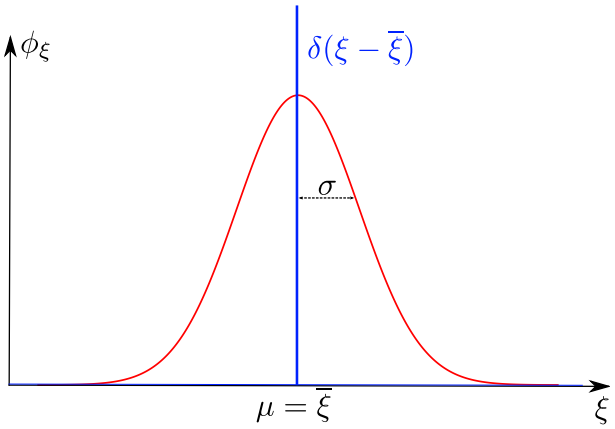


FIGURE 3.1 – ***Forme de la distribution pour une variable ξ : distribution gaussienne et sa limite d'écart-type nul, la distribution de Dirac.***

L'hypothèse de monodispersion en vitesse et température permet de concentrer l'effort de modélisation et la puissance de calcul sur la discrétisation de l'espace des tailles (voir le paragraphe § 3.4.3.5). Ce choix se justifie donc particulièrement lorsque la physique des cas à traiter implique une forte polydispersion en taille, comme c'est typiquement le cas des sprays évaporants. En contrepartie, cette approche pose un problème important : elle conduit à un système mathématique mal posé. En effet, la monodispersion en vitesse (distribution de Dirac) implique la nullité du tenseur de pression particulaire (3.56). Le système d'équations obtenu est alors analogue à celui de la ***dynamique des gaz sans pression*** (BOUCHUT et al. [26]). A ce titre, sa structure mathématique est faiblement hyperbolique. Il n'existe pas de propagation acoustique, ce qui peut entrainer l'apparition de δ-chocs au moment de la résolution du système. C'est notamment ce qui se produit en cas de croisements de trajectoires, comme on peut l'observer sur la Figure 3.2. Plus de détails à ce sujet seront fournis au Chapitre 8 (voir en particulier le paragraphe § 8.2.3).

Pour éviter ces problèmes et décrire fidèlement les croisements de trajectoire, il faut relaxer l'hypothèse monocinétique. En effet, nous avons vu qu'en transportant certains moments d'ordre 2 en vitesse, il est possible de reconstituer une distribution en vitesse, donc un terme de pression particulaire, et ainsi de rendre le système hyperbolique et éviter l'apparition des δ-chocs. Parmi les méthodes développées en ce sens, on peut citer la méthode

15. On parle d'***hypothèse monocinétique*** dans le cas de la vitesse.
16. La loi de Gauss (3.57) admet une distribution de Dirac pour limite lorsque l'écart-type σ tend vers zéro.

Anisotropic Gaussian (DOISNEAU [71], VIÉ et al. [280]). La distribution en vitesse est représentée sous la forme d'une gaussienne faisant intervenir un tenseur anisotrope qui regroupe tous les moments d'ordre 2 en vitesse. Ces derniers sont au nombre de 3 en dimension 2 (covariances dans les directions x, y, et $x-y$) et au nombre de 6 en dimension 3 (covariances dans les directions x, y, z, $x-y$, $x-z$ et $y-z$), ce qui implique autant d'équations de transport supplémentaires. Il a été démontré que cette méthode conduit à un système d'équations bien posé mathématiquement. Il est notamment hyperbolique et admet une entropie (BERTHON [20]), ce qui prévient effectivement l'apparition de δ-chocs, et rend par ailleurs possible l'utilisation des schémas numériques classiques développés dans le cadre de la dynamique des gaz.

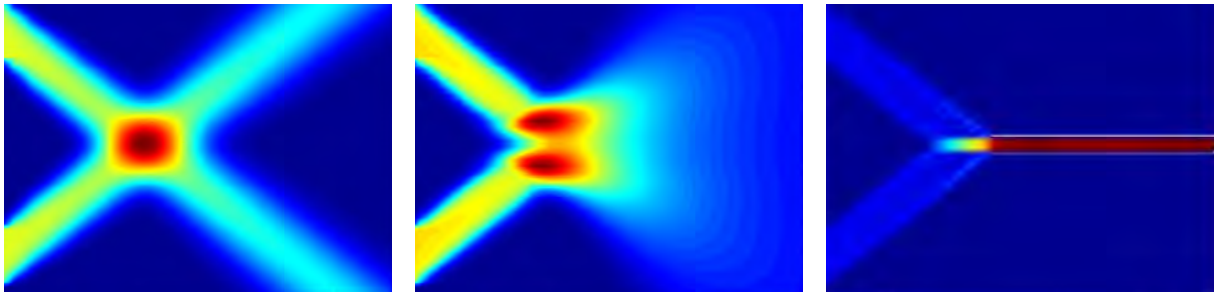


FIGURE 3.2 – ***Simulation d'un croisement sans collisions de particules de même taille, en fonction de la reconstruction en vitesse. De gauche à droite : deux vitesses, Gaussien Anisotrope, monocinétique. Issu de*** **DOISNEAU** ***[71].***

Par ailleurs, il est à noter l'absence de travaux similaires quant à la dispersion en température. A l'heure actuelle, il semble que l'hypothèse de monodispersion en température soit unanimement partagée par tous les modèles eulériens dédiés à la phase dispersée. Ceci s'explique probablement par l'influence moindre de la dispersion locale en température en comparaison des dispersions en taille et vitesse. En effet, même dans les cas à forte variation de température (écoulements réactifs et particules évaporantes), une dispersion locale non négligeable de la température pour des particules de même taille impliquerait que ces particules proviennent de régions de l'écoulement où la température de la phase porteuse est sensiblement différente. Or, dans ce cas, ces particules ont justement peu de chances d'avoir une taille voisine, dans la mesure où celles qui proviennent des régions à haute température se sont davantage évaporées que les autres. Par ailleurs, la monodispersion en température ne pose pas les problèmes mathématiques que pose la monodispersion en vitesse quant à l'hyperbolicité du système d'équations, ce qui constitue un argument supplémentaire pour se contenter de l'hypothèse de monodispersion en température.

3.4.3.3 Discussion sur la validité de l'hypothèse de monodispersion en vitesse

La validité de l'hypothèse de monodispersion locale en vitesse peut s'évaluer au regard du nombre de Stokes des particules. Ce nombre adimensionnel compare le temps caractéristique de relaxation dynamique des particules τ_p à un temps caractéristique de la phase porteuse (phase gazeuse) noté τ_g :

$$\mathrm{St} = \frac{\tau_p}{\tau_g} \,. \tag{3.61}$$

Le nombre de Stokes caractérise ainsi le temps de réponse des particules à une variation de la vitesse du gaz. L'expression de τ_p dépend directement de la taille des particules, en l'occurrence de leur diamètre au carré. Dans le régime de Stokes (voir les définitions complètes en § 7.1.1), nous avons par exemple :

$$\tau_p = \frac{\rho_0 d_p^2}{18\mu_g} \,, \tag{3.62}$$

où μ_g désigne la viscosité dynamique de la phase gazeuse et d_p le diamètre des particules (évidemment relié à la taille s utilisée jusqu'à présent). Deux cas limites sont alors à distinguer selon la valeur du nombre de Stokes (DE CHAISEMARTIN [55]) :

(i) si $\mathrm{St} \ll 1$, les particules réagissent instantanément aux variations de vitesse de la phase porteuse. Elles se comportent comme des traceurs et suivent les lignes de courant du gaz. Localement, elles ont donc une unique vitesse, celle de la phase gazeuse. L'hypothèse monocinétique n'est pas mise en défaut.

(ii) si $\mathrm{St} \gg 1$, l'inertie des particules est telle qu'elles sont insensibles aux variations de la phase porteuse. Des croisements de trajectoires peuvent survenir. Lorsqu'il s'agit de particules de taille équivalente, l'hypothèse de monocinéticité locale est donc mise en défaut.

Par ailleurs, l'interaction de la phase dispersée avec l'éventuelle turbulence du gaz joue également un rôle important. Même dans le cas de particules très peu inertielles (St $\ll 1$), si les structures turbulentes ne sont pas complètement résolues (approches RANS ou LES), alors il existe une énergie cinétique turbulente de la phase gazeuse en sous-maille. Celle-ci génère inévitablement une dispersion de la vitesse des particules en sous-maille, qui n'est pas prise en compte avec l'hypothèse de monocinéticité.

3.4.3.4 Hypothèses retenues dans cette étude

Dans la présente étude, nous envisageons une approche LES de la turbulence pour décrire la phase porteuse (cf. Chapitre 4 et Chapitre 5). L'absence de description de l'interaction turbulence-phase dispersée, inhérente à l'hypothèse monocinétique, est donc beaucoup moins problématique que si nous adoptions une approche RANS. Malgré tout, les problèmes évoqués précédemment quant à la structure mathématique du système d'équations et la survenue de δ-chocs et d'accumulations en cas de croisements de trajectoires de particules de même taille se posent toujours. En pratique, il est tout de même possible d'utiliser l'approche monocinétique pour traiter les cas avec croisements de trajectoires si l'on accepte les imprécisions qui en résultent, et tant que les accumulations de particules ne mettent pas en péril la stabilité des simulations.

Nous faisons donc le choix de l'approche monocinétique pour la suite de l'étude. Et ce d'autant plus que les méthodes incluant la polydispersion en vitesse sont toujours à l'état de développement et ne sont pas encore disponibles dans le code CEDRE que nous allons utiliser [17] (voir la Partie II). ***Nous nous plaçons ainsi à partir de maintenant dans le cadre des hypothèses de monodispersion, à la fois en vitesse et en température***. Afin d'établir un modèle complet pour la phase dispersée, il ne reste plus à ce stade qu'à traiter la polydispersion en taille. Ceci passe par une stratégie de discrétisation de l'espace des tailles.

3.4.3.5 Discrétisation de l'espace des tailles

Plusieurs approches sont possibles pour discrétiser l'espace des tailles et permettre ainsi l'intégration du système semi-cinétique (3.53) sur la variable taille :

$$\int_s \text{Sys. (3.53)}\, \mathrm{d}s\,. \tag{3.63}$$

Ces différentes approches sont détaillées dans les paragraphes qui suivent. Dans tous les cas nous allons négliger les termes de dilatation Δ_ρ, $\Delta_{\rho \boldsymbol{v}}$ et $\Delta_{\rho e}$ mis en évidence dans le système semi-cinétique, afin de retrouver les équations classiques des modèles de la littérature.

Modèle bi-fluide

Le modèle bi-fluide constitue l'approche la plus simple pour traiter l'espace des tailles. Il s'agit simplement d'appliquer l'hypothèse de monodispersion locale déjà utilisée pour la vitesse et la température. Toutes les gouttes situées à un instant t au voisinage du point $\boldsymbol{x}$ sont supposées avoir la même taille moyenne $\overline{s}$. La distribution locale des tailles ϕ_s est ainsi représentée sous la forme d'une distribution de Dirac (cf. Figure 3.3) :

$$\phi_s\left(t, \boldsymbol{x}, s\right) = \delta\left[s - \overline{s}\left(t, \boldsymbol{x}\right)\right]. \tag{3.64}$$

Il s'ensuit que l'on peut décorréler la densité en nombre de gouttes de la variable taille, et introduire par exemple $n\left(t, \boldsymbol{x}\right)$ tel que :

$$\overline{n}\left(t, \boldsymbol{x}, s\right) = n\left(t, \boldsymbol{x}\right) \delta\left[s - \overline{s}\left(t, \boldsymbol{x}\right)\right]. \tag{3.65}$$

De même pour la fraction volumique, nous pouvons introduire $\alpha\left(t, \boldsymbol{x}\right)$ tel que :

$$\overline{\alpha}\left(t, \boldsymbol{x}, s\right) = \alpha\left(t, \boldsymbol{x}\right) \delta\left[s - \overline{s}\left(t, \boldsymbol{x}\right)\right]. \tag{3.66}$$

Dans cette conditions, l'intégration du système semi-cinétique (3.53) sur la variable taille conduit au système bi-fluide (3.67). Les détails calculatoires de cette procédure, ainsi que les définitions et hypothèses sous-jacentes, sont reportées en Annexe B. Nous pouvons toutefois préciser ici les points suivants :

- les termes de coalescence et de fragmentation Γ_k et Q_k disparaissent dans le modèle bi-fluide. En réalité, ils ne pourraient simplement pas être modélisés dans la mesure où ils sont par essence incompatibles avec la description monodisperse [18].

17. Des travaux (DUPIF [80]) sont en cours pour intégrer une méthode de type Anisotropic Gaussian (VIÉ et al. [280]) au solveur eulérien SPIREE de CEDRE.

18. Les processus de fragmentation et de coalescence impliquent par définition une dispersion locale non nulle de la taille des gouttes. Les gouttes "filles" ont une taille forcément inférieure à celle de la goutte "mère" dont elles sont issues par fragmentation. A l'inverse, la coalescence de deux gouttes génère une goutte de taille supérieure à celles des gouttes initiales.

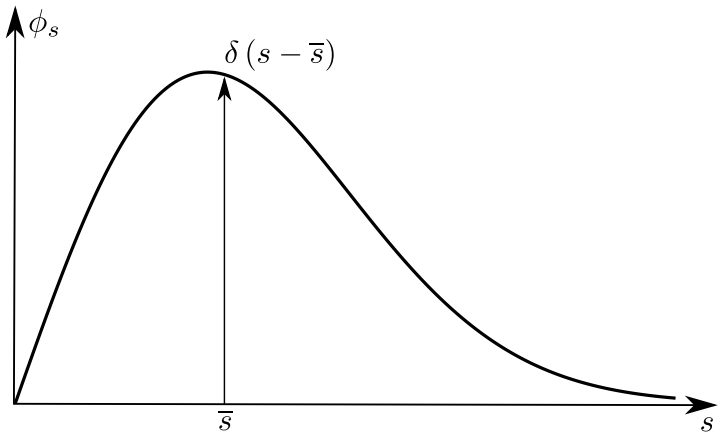


FIGURE 3.3 – ***Représentation de la fonction de distribution en taille dans le modèle bi-fluide.***

– nous avons fait apparaitre $\dot{m}_v$, $\boldsymbol{F_{dr}}$ et Φ_c, respectivement le débit massique par évaporation-condensation à la surface d'une goutte (kg/s), la force de traînée exercée sur une goutte (N), et le flux de chauffage d'une goutte (W). Les définitions rigoureuses de ces termes à partir des expressions du système semi-cinétique sont données en Annexe B. Il est utile de les faire apparaitre car c'est généralement sous ces formes que sont fournis les modèles classiques à l'échelle de la goutte (cf. § 7.1).

– du fait de l'hypothèse monodisperse "généralisée" (taille, vitesse, température), l'évaluation des modèles classiques à l'échelle de la goutte (cf. § 7.1) ne pose pas de difficulté. Il suffit d'évaluer $\dot{m}_v$, $\boldsymbol{F_{dr}}$ et Φ_c à partir des grandeurs moyennes $\overline{s}$, $\overline{\boldsymbol{v}}$ et $\overline{\theta}$. Nous verrons que lorsque la discrétisation de l'espace des tailles introduit une description continue de la distribution en taille (cf. § "Méthodes sectionnelles" ci-dessous), ces modèles à l'échelle de la goutte doivent être intégrés sur la variable taille.

$$\left\{\begin{array}{lcll} \dfrac{\partial n}{\partial t} & + \nabla\cdot\left(n\overline{\boldsymbol{v}}\right) & = & 0 \\ \dfrac{\partial \alpha\rho_0}{\partial t} & + \nabla\cdot\left(\alpha\rho_0\widetilde{\boldsymbol{v}}\right) & = & -n\dot{m}_v \\ \dfrac{\partial \alpha\rho_0\widetilde{\boldsymbol{v}}}{\partial t} & + \nabla\cdot\left(\alpha\rho_0\widetilde{\boldsymbol{v}}\otimes\widetilde{\boldsymbol{v}}\right) & = & -n\dot{m}_v\widetilde{\boldsymbol{v}} + n\boldsymbol{F_{dr}} \\ \dfrac{\partial \alpha\rho_0\widetilde{e}}{\partial t} & + \nabla\cdot\left(\alpha\rho_0\widetilde{e}\widetilde{\boldsymbol{v}}\right) & = & -n\dot{m}_v\widetilde{e} + n\Phi_c \end{array}\right. \tag{3.67}$$

Le système bi-fluide (3.67) inclut une équation sur l'énergie interne. Or il est parfois préférable de disposer d'une équation sur l'énergie totale des particules $\widetilde{e_T}$ (somme de l'énergie interne $\widetilde{e}$ et de l'énergie cinétique $\widetilde{v}^2/2$), notamment pour des raisons de couplage avec la phase gazeuse. En effet, les équations de Navier-Stokes intègrent généralement une équation sur l'énergie totale (cf. Chapitre 5). Une équation sur l'énergie totale peut être facilement obtenue en combinant l'équation sur l'énergie interne et celle sur l'énergie cinétique (obtenue via la quantité de mouvement), comme cela est décrit en Annexe B. Dans ce cas, nous obtenons la version alternative (3.68) du système bi-fluide. Il apparait ainsi un terme supplémentaire, le travail de la force de traînée.

$$\left\{\begin{array}{lcl} \dfrac{\partial n}{\partial t} + \nabla\cdot\left(n\overline{\boldsymbol{v}}\right) = 0 \\ \dfrac{\partial \alpha\rho_0}{\partial t} + \nabla\cdot\left(\alpha\rho_0\widetilde{\boldsymbol{v}}\right) = -n\dot{m}_v \\ \dfrac{\partial \alpha\rho_0\widetilde{\boldsymbol{v}}}{\partial t} + \nabla\cdot\left(\alpha\rho_0\widetilde{\boldsymbol{v}}\otimes\widetilde{\boldsymbol{v}}\right) = -n\dot{m}_v\widetilde{\boldsymbol{v}} + n\boldsymbol{F_{dr}} \\ \dfrac{\partial \alpha\rho_0\widetilde{e_T}}{\partial t} + \nabla\cdot\left(\alpha\rho_0\widetilde{e_T}\widetilde{\boldsymbol{v}}\right) = -n\dot{m}_v\widetilde{e_T} + n\Phi_c + n\boldsymbol{F_{dr}}\cdot\widetilde{\boldsymbol{v}} \end{array}\right. \tag{3.68}$$

Par ailleurs, si l'on exprime la taille moyenne $\overline{s}$ en terme de diamètre moyen, noté par exemple $\overline{D}$, alors celui-ci s'obtient en fonction de α et n selon la relation suivante :

$$\overline{D} = \left(\frac{6\alpha}{\pi n}\right)^{1/3} . \tag{3.69}$$

Lorsque l'on souhaite caractériser (expérimentalement par exemple) la granulométrie d'un spray dont la distribution des diamètres est polydisperse, on a recours à la notion de diamètre statistique moyen. Il est possible d'en définir une infinité en utilisant la formule générale :

$$D_{pq}^{p-q} = \frac{\displaystyle\int_0^{+\infty} D^p \phi_D(D)\,\mathrm{d}D}{\displaystyle\int_0^{+\infty} D^q \phi_D(D)\,\mathrm{d}D} , \tag{3.70}$$

où ϕ_D est la fonction de distribution des diamètres. Les diamètres les plus courants sont le diamètre moyen arithmétique D_{10}, le diamètre moyen volumique D_{30}, ou encore le diamètre moyen de Sauter (ou SMD pour Sauter Mean Diameter) D_{32} [19]. Ici, le diamètre moyen $\overline{D}$ caractérisé par la fraction volumique et la densité en nombre de gouttes (cf. (3.69)) correspond donc formellement au diamètre statistique volumique D_{30}.

Méthode multi-classes

La méthode multi-classes constitue une extension polydisperse de la méthode bi-fluide (LAURENT et MASSOT [167]). La distribution locale des tailles ϕ_s n'est plus représentée par une unique distribution de Dirac, mais elle est échantillonnée [20] en N_c distributions de Dirac (voir la Figure 3.4). La dénomination de ***classe*** est employée pour désigner un échantillon de la fonction de distribution. Comme dans l'approche bi-fluide, chaque classe j ($1 \leq j \leq N_c$) est caractérisée par une seule taille moyenne $\overline{s}_{[j]}$, une seule vitesse moyenne $\overline{\boldsymbol{v}}_{[j]}$ et une seule seule température moyenne $\overline{\theta}_{[j]}$. L'établissement des équations de la méthode multi-classes à partir du niveau semi-cinétique est détaillé en Annexe B.

Il faut retenir que si l'approche multi-classes peut être vue comme un échantillonnage de la fonction de distribution (comme illustré sur la Figure 3.4), elle provient plus formellement de ***l'intégration parallèle et indépendante de plusieurs systèmes semi-cinétiques différents***. On obtient ainsi un système d'équations identique à celui du modèle bi-fluide ***pour chacune des classes***. Dans le cas où l'on choisit d'utiliser une équation pour l'énergie totale et pas pour l'énergie interne, le système d'équations pour une classe j est donné en (3.71).

19. Le SMD caractérise le diamètre d'une goutte qui aurait le même rapport volume sur surface que l'ensemble des gouttes du spray. Il constitue donc le diamètre statistique le plus pertinent lorsqu'il s'agit de caractériser des phénomènes qui se déroulent à la surface des gouttes, tels que les transferts de masse et de chaleur avec la phase porteuse.

20. La méthode multi-classes est aussi nommée "méthode d'échantillonnage" ou "sampling method" en anglais.

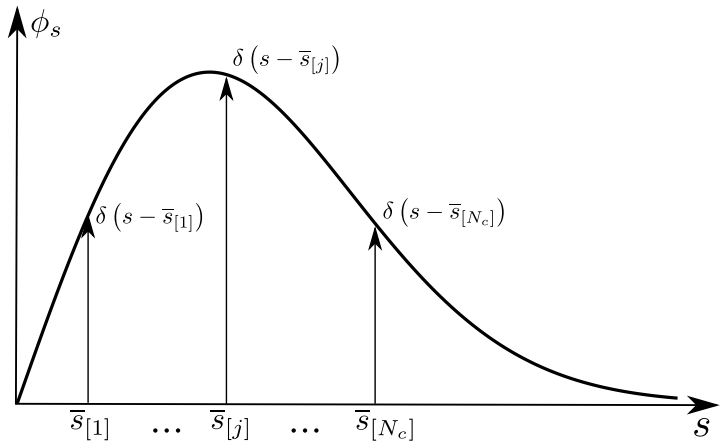


FIGURE 3.4 – ***Échantillonnage de la fonction de distribution en taille dans la méthode multi-classe.***

$$
1 \leq j \leq N_c, \left\{ \begin{array}{llll}
\dfrac{\partial n_{[j]}}{\partial t} & + \nabla \cdot \left(n_{[j]} \overline{\boldsymbol{v}}_{[j]} \right) & = & 0 \\
\dfrac{\partial \alpha_{[j]} \rho_{0,[j]}}{\partial t} & + \nabla \cdot \left(\alpha_{[j]} \rho_{0,[j]} \widetilde{\boldsymbol{v}}_{[j]} \right) & = & -n_{[j]} \dot{m}_{v,[j]} \\
\dfrac{\partial \alpha_{[j]} \rho_{0,[j]} \widetilde{\boldsymbol{v}}_{[j]}}{\partial t} & + \nabla \cdot \left(\alpha_{[j]} \rho_{0,[j]} \widetilde{\boldsymbol{v}}_{[j]} \otimes \widetilde{\boldsymbol{v}}_{[j]} \right) & = & -n_{[j]} \dot{m}_{v,[j]} \widetilde{\boldsymbol{v}}_{[j]} + n_{[j]} \boldsymbol{F_{dr}}_{[j]} \\
\dfrac{\partial \alpha_{[j]} \rho_{0,[j]} \widetilde{e_T}_{[j]}}{\partial t} & + \nabla \cdot \left(\alpha_{[j]} \rho_{0,[j]} \widetilde{e_T}_{[j]} \widetilde{\boldsymbol{v}}_{[j]} \right) & = & -n_{[j]} \dot{m}_{v,[j]} \widetilde{e_T}_{[j]} + n_{[j]} \Phi_{c,[j]} \\
 & & & + n_{[j]} \boldsymbol{F_{dr}}_{[j]} \cdot \widetilde{\boldsymbol{v}}_{[j]}
\end{array} \right. \tag{3.71}
$$

Par ailleurs, comme expliqué en Annexe B, les classes sont indépendantes les unes des autres. Elles ne se "voient" pas directement par l'intermédiaire de termes sources ou de flux, comme c'est le cas avec les méthodes sectionnelles (cf. § "Méthodes sectionnelles" ci-dessous). Elles peuvent cependant s'influencer indirectement par l'intermédiaire de la phase gazeuse si elles sont couplées avec celle-ci en mode "two-way".

Méthodes sectionnelles

A la différence des approches précédentes, l'objectif des méthodes sectionnelles est d'apporter une ***description continue de la distribution en taille***, et ainsi pouvoir décrire les phénomènes d'interaction entre particules, mais également apporter une meilleure précision dans l'***évaluation des termes sources d'interaction avec la phase gazeuse***, lorsque la phase dispersée est fortement polydisperse. Pour cela, l'espace des tailles est discrétisé en un certain nombre d'intervalles, appelés ***sections***. Les travaux précurseurs de Tambour ont d'abord introduit l'approche sectionnelle de manière empirique. Par la suite, les travaux de GREENBERG et al. [115] puis ceux de LAURENT et MASSOT [167] [21] ont permis d'établir le lien avec l'équation cinétique.

A la différence des classes dans la méthode multi-classes, les sections ne sont pas indépendantes les unes des autres. Par exemple, lorsque les gouttes d'une section donnée s'évaporent, la répartition des gouttes dans cette section se déplace vers la borne inférieure (puisque la taille des gouttes diminue). La section cède alors de la

21. Les méthodes sectionnelles sont qualifiées de "méthodes multi-fluides" par ces auteurs dans la référence citée, et dans la plupart de leurs travaux ultérieurs.

masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie à la section immédiatement inférieure, en plus d'en céder à la phase gazeuse. De plus, la description continue de l'espace des tailles permet la prise en compte des phénomènes de coalescence et de fragmentation via des échanges entre sections. Les sections sont donc couplées les unes aux autres par l'intermédiaire de flux. En ce sens, les méthodes sectionnelles constituent en quelque sorte une discrétisation de type "volumes finis" de la distribution en taille. D'un point de vue mathématique, l'espace des tailles $I_s = [0, +\infty[$ est discrétisé en un nombre N_s de sections $I_s^{(k)} = [s_{k-1}, s_k[$ (cf. Figure 3.5), avec $1 \leq k \leq N_s$, tel que :

$$I_s = \bigcup_{k=1}^{N_s} I_s^{(k)} = [0, +\infty[\ . \tag{3.72}$$

Les bornes s_{k-1} et s_k de chaque section sont fixes et pré-définies. La densité en nombre pour une taille s donnée (celle qui intervient dans les équations du système semi-cinétique (3.53)) peut alors s'écrire comme la somme des densités en nombre de chaque section :

$$\overline{n}(t, \boldsymbol{x}, s) = \sum_{k=1}^{N_s} \overline{n}^{(k)}(t, \boldsymbol{x}, s) \ . \tag{3.73}$$

On fait ensuite l'hypothèse qu'il est possible de découpler la dépendance en taille et les dépendances temporelle et spatiale de la densité en nombre dans chaque section, en écrivant :

$$\overline{n}^{(k)}(t, \boldsymbol{x}, s) = n^{(k)}(t, \boldsymbol{x}) \phi_s^{(k)}(t, \boldsymbol{x}, s) \ , \tag{3.74}$$

où $n^{(k)}(t, \boldsymbol{x})$ est la densité volumique moyenne en nombre (moment d'ordre 0 en taille) et $\phi_s^{(k)}$ est une fonction de distribution normalisée, c'est-à-dire telle que :

$$\int_{I_s^{(k)}} \phi_s^{(k)}(t, \boldsymbol{x}, s) \, \mathrm{d}s = 1 \ . \tag{3.75}$$

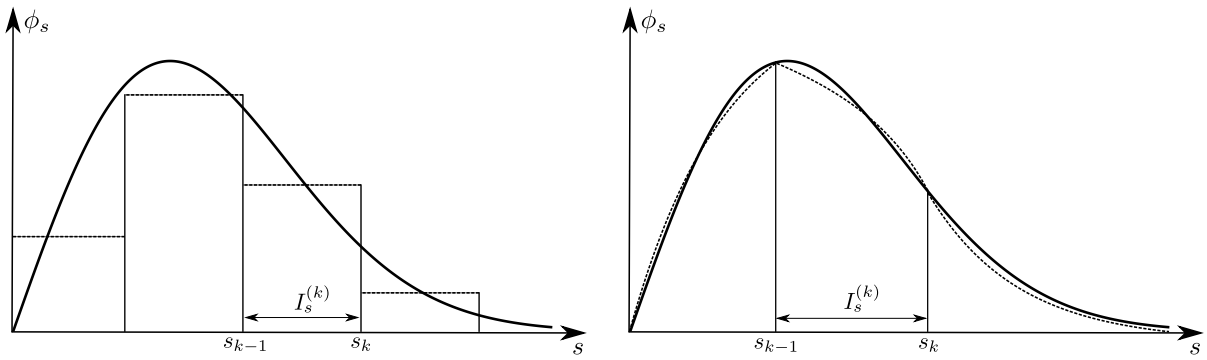


FIGURE 3.5 – *Représentation de la fonction de distribution en taille dans les méthodes sectionnelles. Gauche : un moment en taille (OSM). Droite : deux moments en tailles (TSM).*

Afin d'établir un système d'équations de conservation pour chaque section, il reste à proposer la forme des fonctions de distribution $\phi_s^{(k)}$. Plusieurs variantes ont été développées dans la littérature. Le choix le plus simple est celui de fonctions de distribution constantes par morceaux (un seul paramètre), qui peuvent être reconstruites à partir d'un seul moment en taille (cf. Figure 3.5). D'où l'appellation OSM pour One Size Moment (LAURENT et MASSOT [167]). Dans ce cas, on montre que la méthode sectionnelle a une convergence d'ordre 1, au sens du nombre de sections nécessaires pour avoir une certaine représentation de la NDF (LAURENT [166]). Pour obtenir une convergence d'ordre 2, il est nécessaire de postuler des fonctions de distribution à deux paramètres, dont la fermeture implique de transporter deux moments de la NDF (typiquement n et ρ). On parle alors de méthodes TSM pour Two Size Moment. Les méthodes de ce type sont par exemple celles qui supposent des fonctions de distribution par section sous forme exponentielle (DUFOUR [77], DUFOUR et VILLEDIEU [78], cf. Figure 3.5) ou affine (SIBRA [251], SIBRA et al. [252], cf. Annexe B). Des méthodes d'ordre plus élevé existent, notamment la méthode EMSM (Eulerian Multi Size Moment) à quatre moments en taille, développée par MASSOT et al. [188] et KAH et al. [154], et étudiée par EMRE [87]. Le transport de quatre moments permet de reconstituer une fonction de distribution qui reproduit fidèlement la forme d'une distribution complète réelle. Cette méthode permet donc, en théorie, de n'utiliser qu'une seule section tout en ayant un niveau de précision sur les termes sources supérieur à une méthode TSM à plusieurs sections (donc plus coûteuse). Mais en pratique, la méthode EMSM n'est pas exempte de difficultés : méthodes numériques dédiées nécessaires pour préserver la réalisabilité, dynamique des

particules moins bien décrite, entre autres. Actuellement, il semble que dans un contexte de simulations à l'échelle "industrielle", les méthodes à deux moments en taille présentent déjà un bon compromis entre précision et coût de calcul (SIBRA [251]).

Aussi, si l'on se concentre sur les méthodes à deux moments en taille, on montre que le système d'équations (3.77) est obtenu pour chaque section k, après intégration du système semi-cinétique (3.53) sur la variable taille, c'est-à-dire après avoir procédé à l'opération suivante dont les détails calculatoires sont précisés dans l'Annexe B :

$$\int_{I_s} \text{Sys. (3.53)}\, \mathrm{d}s \,. \tag{3.76}$$

On note que le système (3.77) intègre une équation sur l'énergie interne, mais qu'une équation sur l'énergie totale s'obtient très simplement en suivant la procédure expliquée en Annexe B, et déjà appliquée précédemment pour les modèles bi-fluide et multi-classes.

$$\left\{\begin{array}{lcll}
\dfrac{\partial n^{(k)}}{\partial t} & + & \nabla\cdot\left(n^{(k)}\widetilde{\boldsymbol{v}}^{(k)}\right) & = \widehat{\Gamma}_1^{(k)} + \widehat{Q}_1^{(k)} + \mathcal{N}_+^{(k)} - \mathcal{N}_-^{(k)} \\
\dfrac{\partial \alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}}{\partial t} & + & \nabla\cdot\left(\alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}\widetilde{\boldsymbol{v}}^{(k)}\right) & = \widehat{\Gamma}_2^{(k)} + \widehat{Q}_2^{(k)} + n^{(k)}\left(\mathcal{E}_+^{(k)} - \mathcal{E}_-^{(k)} - \dot{m}_v^{(k)}\right) \\
\dfrac{\partial \alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}\widetilde{\boldsymbol{v}}^{(k)}}{\partial t} & + & \nabla\cdot\left(\alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}\widetilde{\boldsymbol{v}}^{(k)}\otimes\widetilde{\boldsymbol{v}}^{(k)}\right) & = \widehat{\Gamma}_3^{(k)} + \widehat{Q}_3^{(k)} + n^{(k)}\boldsymbol{F_{dr}}^{(k)} \\
 & & & + n^{(k)}\left(\widetilde{\boldsymbol{v}}^{(k+1)}\mathcal{E}_+^{(k)} - \widetilde{\boldsymbol{v}}^{(k)}\mathcal{E}_-^{(k)} - \widetilde{\boldsymbol{v}}^{(k)}\dot{m}_v^{(k)}\right) \\
\dfrac{\partial \alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}\widetilde{e}^{(k)}}{\partial t} & + & \nabla\cdot\left(\alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}\widetilde{e}^{(k)}\widetilde{\boldsymbol{v}}^{(k)}\right) & = \widehat{\Gamma}_4^{(k)} + \widehat{Q}_4^{(k)} + n^{(k)}\Phi_c^{(k)} \\
 & & & + n^{(k)}\left(\widetilde{e}^{(k+1)}\mathcal{E}_+^{(k)} - \widetilde{e}^{(k)}\mathcal{E}_-^{(k)} - \widetilde{e}^{(k)}\dot{m}_v^{(k)}\right)
\end{array}\right. \tag{3.77}$$

$$\boldsymbol{1 \le k \le N_s}$$

L'Annexe B présente plus en détail l'établissement des équations à partir du système semi-cinétique. Les hypothèses sous-jacentes et les définitions des termes du système (3.77) y sont aussi présentées. Résumons simplement ici les quelques points suivants :

- Afin de fermer les équations, il apparait nécessaire de formuler l'hypothèse que dans chaque section ***la vitesse et la température (donc l'énergie interne) ne dépendent pas de la taille des gouttes*** :

$$\begin{array}{lcllcll}
\overline{\boldsymbol{v}}(t,\boldsymbol{x},s) & = & \overline{\boldsymbol{v}}^{(k)}(t,\boldsymbol{x}) & \text{si } s\in I_s^{(k)} & \overline{\theta}(t,\boldsymbol{x},s) & = & \overline{\theta}^{(k)}(t,\boldsymbol{x}) \quad \text{si } s\in I_s^{(k)} \\
\widetilde{\boldsymbol{v}}(t,\boldsymbol{x},s) & = & \widetilde{\boldsymbol{v}}^{(k)}(t,\boldsymbol{x}) & \text{si } s\in I_s^{(k)} & \widetilde{e}(t,\boldsymbol{x},s) & = & \widetilde{e}^{(k)}(t,\boldsymbol{x}) \quad \text{si } s\in I_s^{(k)}
\end{array} \tag{3.78}$$

  Cette hypothèse est plus forte que l'hypothèse de monodispersion en vitesse et température formulée en § 3.4.3.2, puisqu'il ne s'agit plus seulement d'avoir une seule vitesse ou une seule température pour une taille donnée, mais pour toutes les tailles d'une section donnée.

- On note que la partie convective du système (membres de gauche des équations) est similaire à celle des modèles bi-fluide et multi-classes. Les méthodes sectionnelles ne se distinguent que dans l'expression des termes sources.

- Les termes $\widehat{\Gamma}^{(k)}$ et $\widehat{Q}^{(k)}$ désignent les termes sources de fragmentation et de coalescence intégrés sur la section k. Les termes $\dot{m}_v^{(k)}$, $\boldsymbol{F_{dr}}^{(k)}$ et $\Phi_c^{(k)}$ sont les termes sources décrivant les transferts de masse, quantité de mouvement et chaleur avec la phase gazeuse. On trouvait déjà ces termes dans les modèles bi-fluide et multi-classes, mais ils sont ici intégrés sur la section k au lieu d'être simplement évalués pour une taille moyenne. Enfin, les termes $\mathcal{N}_+^{(k)}$ et $\mathcal{N}_-^{(k)}$, $\mathcal{E}_+^{(k)}$ et $\mathcal{E}_-^{(k)}$, représentent des flux aux bornes des sections.

- Le calcul des termes sources intégrés sur les sections passe par le calcul préalable des coefficients qui définissent les fonctions de distribution $\phi_s^{(k)}$ dans chaque section. Ces coefficients sont obtenus en inversant les relations qui les lient aux moments transportés, c'est-à-dire $n^{(k)}$ et $\rho^{(k)}$. Le choix de la forme postulée pour les fonctions de distribution a alors son importance, dans la mesure où il conditionne la possibilité d'une résolution analytique. Lorsque la résolution analytique n'est pas possible, il faut avoir recours à des calculs d'intégrales numériques potentiellement coûteux. C'est ce type de considération qui tend aujourd'hui à favoriser la reconstruction affine par rapport à la reconstruction exponentielle (SIBRA [251], SIBRA et al. [252]).

– Au-delà des modèles physiques qui permettent d'exprimer les termes sources à l'échelle de la goutte (cf. Chapitre 7), il devient nécessaire de mettre en place des schémas numériques spécifiques pour l'intégration temporelle des termes sources qui traduisent des flux entre sections. Cela concerne la coalescence, la fragmentation et l'évaporation. Dans ce dernier cas, les schémas numériques développés par SIBRA et al. [252] sont analogues aux schémas de flux classiques des méthodes volumes finis, à la différence qu'ils décrivent des flux dans l'espace des tailles et non dans l'espace physique. On retrouve ainsi des notions telles que la stabilité des schémas conditionnée par le respect d'un critère CFL, qualifié dans ce cas de CFL "évaporant". Nous n'abordons pas plus ces aspects ici et renvoyons le lecteur intéressé vers les travaux de DUFOUR [77], DOISNEAU [71] et SIBRA [251].

Méthodes sectionnelles : au-delà de l'hypothèse mono-vitesse

Les méthodes sectionnelles à un ou plusieurs moments en taille évoquées dans le paragraphe précédent utilisent toutes l'hypothèse d'une vitesse unique au sein de chaque section. Par conséquent, moins on utilise de sections, plus on trouve de tailles différentes, donc de nombres de Stokes différents, au sein d'une même section. Et donc plus la validité de l'hypothèse mono-vitesse est mise à mal. Or, l'utilisation d'un nombre de plus en plus réduit de sections est justement le but des méthodes à plusieurs moments en taille. Pour pallier à cette contradiction, des méthodes ont été développées très récemment et sont encore en cours de développement. Elles visent à restituer des profils de vitesse non constants par section, et ainsi apporter une description plus fidèle de la dynamique des particules. La méthode CSVM (pour Coupled-Size-Velocity Moment method), développée par VIÉ et al. [281], institue ainsi un couplage entre la taille et la vitesse dans le cadre de la méthode EMSM à quatre moments en taille. La méthode CSVTSM (pour Coupled-Size-Velocity Two Size Moment method), proposée par DOISNEAU [71], est elle dédiée aux méthodes à deux moments en taille.

3.5 Couplage entre modèles à "phases séparées" et à "phase dispersée"

Dans la classification des méthodes qui permettent de décrire les écoulements diphasiques issus de l'atomisation de jets liquides (cf. § 3.1), nous avons introduit une catégorie des "méthodes couplées". Partant du constat que l'atomisation des jets liquides est un phénomène fortement multi-échelles, et qu'aucune méthode n'est capable de décrire parfaitement toutes les échelles du problèmes, il semble attrayant de combiner les capacités respectives de plusieurs méthodes. Nous avons vu que les méthodes à suivi d'interface ou à interfaces diffuses étaient bien adaptées pour décrire l'écoulement à phases séparées en sortie de l'injecteur. En revanche, elles ne sont pas adaptées pour décrire la phase dispersée plus en aval dans la chambre. Soit parce que cela nécessiterait des maillages beaucoup trop fins (cas des méthodes à suivi d'interface), soit parce qu'elles ne permettent pas une description fine de la polydispersion locale en sous-maille (cas des méthodes à interfaces diffuses). A l'inverse, les méthodes statistiques dédiées à la phase dispersée ne sont pas du tout adaptées à la zone de l'écoulement à phases séparées.

C'est donc tout naturellement que des méthodes hybrides, combinant les deux visions, ont vocation à être développées. Il existe cependant une difficulté majeure pour atteindre cet objectif, qui est représentée sur la Figure 3.6 et qui peut s'exprimer de la manière suivante. Comment passer d'un formalisme où une structure liquide est captée par le maillage (son rayon de courbure est très supérieur à la taille caractéristique du maillage), à un formalisme où le volume de cette même structure liquide est sensé être très inférieur au volume d'une seule maille ?

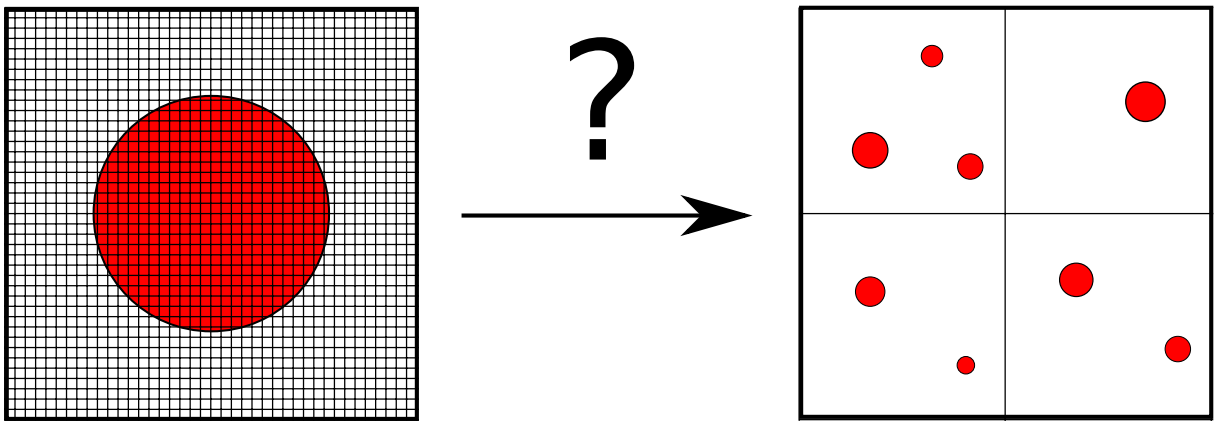


FIGURE 3.6 – *Schéma illustrant la difficulté du couplage entre les formalismes des méthodes à interface (gauche) et des méthodes particulaires (droite).*

Nous avons déjà évoqué précédemment les tentatives de BEAU [18] et LEBAS [174] pour introduire un couplage entre un modèle à interface diffuse (en l'occurrence de type "4 équations" ou LHF), associé à une équation de transport pour la densité d'aire interfaciale dans la zone "phases séparées", et une description lagrangienne des gouttes. Une approche similaire a aussi été développée par SOMMERFELD et DEUX [256].

Les travaux récents de HERRMANN [136] constituent la première démarche de couplage entre des modèles à suivi d'interface et une description lagrangienne des gouttes. Cet auteur a développé un algorithme qui permet, au cours d'une simulation eulérienne avec suivi d'interface, d'identifier les structures liquides candidates à un suivi lagrangien, puis de les transférer de la description eulérienne vers la description lagrangienne. Les critères de détection sont simplement basés sur le volume et la forme de la structure liquide, décrite par la valeur de son excentricité. Il s'agit évidemment de transférer des structures ressemblant un maximum à des gouttes afin de respecter les hypothèses rendant possible un suivi lagrangien.

L'algorithme est applicable a priori à toute méthode de suivi d'interface (Level Set, Volume of Fluid et leurs variantes), néanmoins la méthode RLSG (Refined Level Set Grid) de HERRMANN [135] semble la plus adaptée. En effet, HERRMANN [136] souligne que cette méthode est la plus à-même de bien appréhender la problématique du transfert entre la description "suivi d'interface" et la description lagrangienne. Le point clé est l'utilisation de deux maillages différents. Un premier maillage, potentiellement non structuré, est utilisé pour résoudre les équations du fluide. En l'occurrence, il s'agit des équations de Navier-Stokes incompressibles. Parallèlement, un second maillage est utilisé uniquement pour le suivi de l'interface, c'est-à-dire pour résoudre l'équation d'advection de la fonction Level Set. Il s'agit d'un maillage cartésien, dont le raffinement est ajusté de manière optimale uniquement à proximité des interfaces. Pour cela, le maillage est décomposé en un certain nombre de blocs, chaque bloc pouvant être "activé" ou "désactivé" selon la distance de la portion d'interface la plus proche (information fournie par la valeur de la fonction Level Set). Ainsi, un bloc "désactivé" n'est constitué que d'une seule maille de calcul, tandis qu'un bloc activé en contient un grand nombre pour bien capter l'interface. Évidemment, la position de l'interface évolue au cours du calcul, et donc les blocs sont successivement activés et désactivés.

Ainsi, puisque l'interface est résolue sur un maillage différent de celui du fluide, donc potentiellement bien plus résolu, il est possible de suivre des structures qui constituent pour le solveur fluide ***des structures de sous-maille***. Le transfert vers une description lagrangienne ne poserait donc pas le problème illustré sur la Figure 3.6 quant au rapport entre le volume de la structure liquide transférée et le volume de la maille "fluide". HERRMANN [137] souligne néanmoins que la différence de résolution entre le maillage "fluide" et le maillage "interface" doit être très grande pour que le volume de la structure transférée soit significativement inférieur à celui de la maille "fluide". Quand ce n'est pas le cas, la méthode n'est pas totalement exempte d'inconsistances numériques pouvant survenir au moment du transfert entre les descriptions eulérienne et lagrangienne (voir à ce sujet la discussion du paragraphe § 10.2.5 au Chapitre 10). Cette méthode a été toutefois été appliquée avec succès à des cas complexes d'atomisation de jets liquides turbulents, notamment dans HERRMANN [137]). Par ailleurs, une approche similaire à celle de HERRMANN [136] a été développée récemment par ARIENTI et al. [8]. L'algorithme de détection des structures liquides candidates au transfert est légèrement différent, et il semble notamment permettre une parallélisation plus efficace.

Finalement, on peut retenir que la mise en place de méthodes couplées est une voie récente mais très prometteuse pour améliorer la simulation numérique de l'atomisation primaire. C'est justement ce type d'approche que nous cherchons à mettre en place dans cette étude, comme nous allons le voir dans la Partie II. Notons simplement ici que notre démarche de couplage va se distinguer de celles citées précédemment sur les deux points suivants :

(i) nous allons utiliser des méthodes à ***interfaces diffuses*** et non des méthodes à suivi d'interface pour décrire la zone à phases séparées.

(ii) nous allons utiliser des méthodes ***statistiques eulériennes*** pour décrire la phase dispersée (cf. § 3.4.3) et non des méthodes lagrangiennes.

Deuxième partie

Couplage de modèles diphasiques pour la simulation numérique du banc Mascotte avec le code CEDRE

Chapitre 4

Justification de la stratégie retenue avec le code CEDRE

La Partie I de ce manuscrit a permis d'établir le contexte bibliographique de l'étude, notamment en ce qui concerne la simulation numérique des écoulements diphasiques atomisants. Nous avons ainsi présenté au Chapitre 3 un certain nombre de modèles et de méthodes numériques susceptibles d'être appliqués à la simulation des écoulements qui nous intéressent. L'objectif de ce premier chapitre de la Partie II est de présenter la stratégie que nous choisissons d'adopter et de la justifier au regard des spécificités du code CEDRE de l'ONERA. Les chapitres suivants de la Partie II fournissent ensuite les détails de cette stratégie en précisant les systèmes d'équations résolus, les modèles classiques utilisés pour les termes sources, et enfin les méthodes numériques de résolution. Les phénomènes physiques ayant requis un travail de modélisation, ainsi que les difficultés numériques qui ont nécessité le développement de nouvelles méthodes, sont mis en évidence ici mais seront présentés spécifiquement dans la Partie III.

Sommaire

4.1 Présentation du code CEDRE **75**
4.2 CEDRE et les écoulements diphasiques **75**
4.3 Présentation et justification de la stratégie retenue **77**

4.1 Présentation du code CEDRE

Le code CEDRE [1] est une plateforme logicielle de simulation numérique multi-physiques développée par l'ONERA. Ses applications principales se trouvent dans le domaine de l'énergétique et de la propulsion (SCHERRER et al. [241]). Il est construit sur la base de plusieurs solveurs, chacun dédié à une physique particulière. Les différents solveurs de CEDRE sont les suivants (REFLOCH et al. [223]) :

- le solveur CHARME résout les équations de Navier-Stokes compressibles et multi-espèces. Il a été développé à l'origine pour simuler les écoulements de mélanges gazeux turbulents et réactifs, subsoniques ou supersoniques. Dans un contexte d'écoulement diphasique, le solveur CHARME s'avère être un solveur à 4 équations, ce qui implique une modélisation en fluide localement homogène ou LHF (cf. Chapitre 3).
- les solveurs SPIREE et SPARTE sont dédiés à la simulation des écoulements diphasiques à phase dispersée (MURRONE et VILLEDIEU [198]), respectivement selon les points de vue eulérien et lagrangien (cf. Chapitre 3).
- le solveur ACACIA résout l'équation de la chaleur. Il permet d'étudier les transferts thermiques par conduction dans les solides.
- les solveurs ASTRE et REA sont dédiés aux transferts radiatifs, le premier résolvant l'équation de transfert radiatif (ETR) sous forme intégrale avec une méthode de Monte-Carlo, le second résolvant l'ETR sous forme différentielle par une méthode aux ordonnées discrètes (TESSÉ et LAMET [266]).
- le solveur FILM résout un modèle de Saint-Venant pour décrire les films liquides ruisselant sur les parois.
- le solveur PEUL est un solveur lagrangien utilisé notamment pour simuler la formation de polluants.

Ces différents solveurs peuvent être couplés les uns aux autres (couplage interne), ce qui permet de mettre en place des simulations multi-physiques. Le code CEDRE peut également être associé à d'autres codes (couplage externe). Les solveurs eulériens de CEDRE reposent sur une discrétisation des équations selon la méthode des volumes finis, sur des maillages non structurés généraux (cf. Chapitre 8), et avec stockage des variables aux centres des cellules (approche "cell-center"). L'utilisation de maillages non structurés acceptant tout type d'élément constitue un atout important pour traiter des configurations de type industriel. Le code est parallélisé et permet donc les calculs multi-processeurs.

L'environnement de calcul CEDRE est représenté schématiquement sur la Figure 4.1. Les maillages sont générés par un logiciel de CAO puis convertis au format CEDRE. Le module de pré-traitement géométrique EPINETTE permet le redimensionnement de la géométrie, son découpage en vue d'un calcul parallèle, ou encore un raffinement ou un déraffinement automatique du maillage. L'interface graphique EPICEA permet la mise en données du calcul par l'utilisateur (modèles physiques, schémas numériques, conditions initiales et aux limites). Enfin, le module EXPLORE permet de post-traiter les résultats issus du calcul CEDRE, et de les convertir en un format permettant la visualisation par un logiciel commercial.

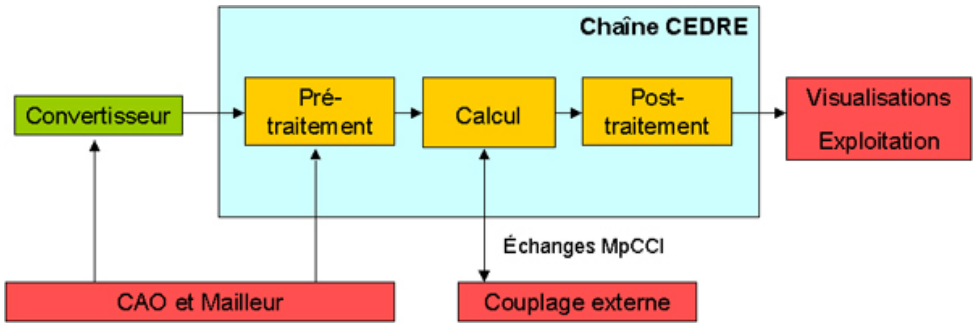


FIGURE 4.1 – *Environnement de calcul CEDRE.*

4.2 CEDRE et les écoulements diphasiques

L'un des objectifs du présent travail, outre améliorer la simulation des écoulements diphasiques issus des injecteurs cryotechniques, est également de participer au développement du code CEDRE. La stratégie que nous allons choisir doit donc tenir compte des spécificités et des potentialités du code. Or, il faut savoir que le code

1. Calcul d'Ecoulements Diphasiques Réactifs pour l'Energétique

CEDRE a été construit initialement sur la base du solveur CHARME, avec pour objectif principal la simulation des écoulements purement gazeux. Les autres solveurs ont été développés par la suite afin d'étendre les champs d'applications du code. En ce qui concerne les écoulements diphasiques, les configurations traitées par CEDRE se sont longtemps limitées aux écoulements strictement à phase dispersée, sur la base d'un couplage du solveur CHARME avec les solveurs SPIREE ou SPARTE. Les écoulements diphasiques à phases séparées, notamment les jets liquides, n'étaient pas traités avec CEDRE. Cette approche était justifiée par le fait que l'on visait principalement des simulations stationnaires des chambres de combustion, en adéquation avec la puissance des machines de calcul, et pour lesquelles une description de l'écoulement à phase dispersée était suffisante.

Ainsi, sur la configuration du banc Mascotte qui nous intéresse dans cette étude (cf. Chapitre 1), les stratégies de simulation suivaient jusqu'à maintenant cette approche. Le jet d'oxygène liquide issu de l'injecteur coaxial n'était donc pas simulé directement. Il était représenté sous la forme d'une condition limite figée (dard liquide artificiel), à partir de laquelle étaient injectées les gouttes (POUROUCHOTTAMANE [218]). Par conséquent, le phénomène d'atomisation primaire n'était pas pris en compte. Cette stratégie, illustrée par la Figure 4.2, était justifiée encore une fois par le fait que l'on visait principalement des calculs stationnaires. Aujourd'hui, avec des machines de calcul qui permettent de généraliser des simulations de type LES, elle montre ses limites. En effet, négliger le phénomène d'atomisation primaire ne permet pas d'appréhender le fonctionnement des moteurs cryotechniques dans sa globalité. C'est le cas en particulier des instabilités de combustion, qui naissent de l'interaction et du couplage entre différents phénomènes, parmi lesquels l'atomisation primaire joue très probablement un rôle important (cf. Chapitre 1).

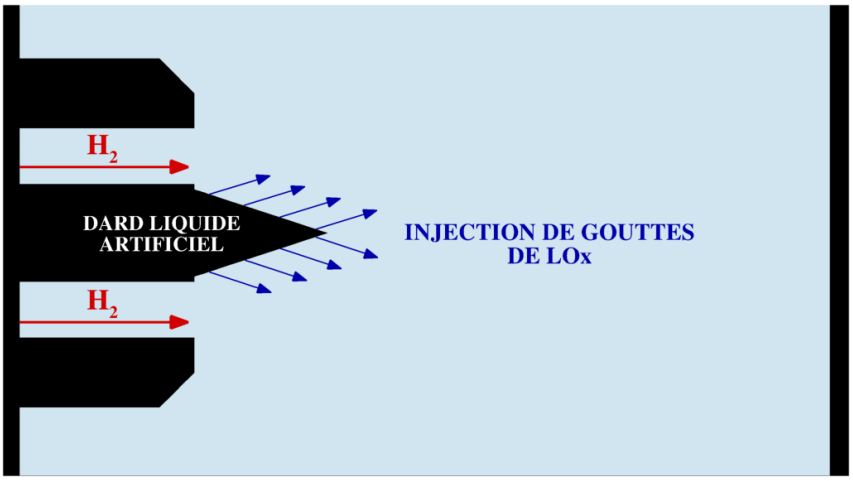


FIGURE 4.2 – ***Simulation de la configuration Mascotte avec dard liquide artificel.***

Pour ces raisons, l'ONERA a désormais la volonté de développer les potentialités "multi-fluide" du code CEDRE, et ainsi diversifier les configurations d'écoulements diphasiques que le code est capable de traiter. A noter que cela ne concerne pas seulement la propulsion liquide, beaucoup d'autres domaines sont intéressés par le développement des potentialités multi-fluide de CEDRE. Ainsi, un certain nombre de développements en ce sens ont été entrepris ces dernières années et sont toujours en cours aujourd'hui. Deux axes de développement ont été menés en parallèle :

1. le premier axe est celui qui nécessite le moins de développements, et il est d'ailleurs achevé au moment où débute cette étude. Il s'agit d'utiliser le solveur CHARME comme un solveur à 4 équations pour les écoulements à phases séparées, tout en y intégrant certaines améliorations dans le traitement des cas diphasiques. Des travaux ont ainsi été menés dans CHARME pour ajouter aux équations des termes liés à la tension de surface, ou encore pour annuler les flux de diffusion entre phases (cf. Chapitre 5).

2. le second axe est plus ambitieux et nécessite des développements bien plus importants que le premier. Il consiste à développer dans CEDRE un nouveau solveur dédié spécifiquement aux écoulements multiphasiques, soit en tant qu'extension du solveur CHARME, soit comme un nouveau solveur à part entière. Ce solveur sera basé sur l'un des modèles à interfaces diffuses présentés au Chapitre 3, en l'occurrence le modèle à 7 équations de Baer-Nunziato, ou éventuellement un modèle relaxé à 5 équations. A noter qu'il n'est pas envisagé de développer des méthodes à suivi d'interface, la philosophie de CEDRE étant plutôt celle des méthodes à interfaces diffuses (voir les arguments du tableau Tableau 3.1 au Chapitre 3).

4.3 Présentation et justification de la stratégie retenue

La stratégie que nous adoptons dans cette étude pour parvenir à la simulation de la configuration Mascotte se place dans le cadre du premier axe de développement de CEDRE. En effet, le développement du solveur multi-fluide n'en est pas à un stade suffisamment avancé pour être utilisé ici. Quoi qu'il en soit, il est intéressant d'évaluer les potentialités du solveur CHARME dans le cadre diphasique, et d'identifier d'éventuelles difficultés.

Nous allons donc utiliser le solveur CHARME pour décrire l'écoulement diphasique à phases séparées en sortie de l'injecteur, ainsi que les zones d'écoulement monophasique gazeux. La modélisation retenue est donc celle d'un modèle à interface diffuse de type "4 équations", encore appelé modèle à fluide localement homogène ou LHF. Le terme ***fluide*** désigne donc ici le mélange traité par le solveur CHARME. Ce fluide est unique dans le sens où il n'est décrit localement (à l'échelle d'une cellule du maillage) que par une seule température, une seule vitesse et une seule pression. Néanmoins, ce fluide est bien diphasique puisqu'il est constitué d'un certain nombre d'espèces gazeuses et d'une espèce liquide (cf. Chapitre 5).

Dans notre stratégie, le solveur CHARME a vocation à simuler le jet d'oxygène liquide en sortie d'injecteur, puis à suivre les premières étapes de son atomisation primaire selon ce que permet le raffinement du maillage. En effet, il est important de préciser dès maintenant que nous visons des simulations de type LES, notamment dans l'optique future d'étudier des phénomènes fortement instationnaires tels que les instabilités de combustion. L'objectif est donc de pouvoir capter au moins les premières instabilités qui surviennent à la surface du jet liquide sous l'effet du cisaillement opéré par le jet d'hydrogène gazeux co-courant (cf. Chapitre 2). Il est également envisageable de décrire les premières structures liquides formées lors du processus d'atomisation primaire (ligaments), tout en conservant une taille de maillage raisonnable. Cependant, il est inenvisageable de poursuivre cette description jusqu'aux gouttes, comme nous l'avons déjà expliqué au Chapitre 3.

C'est pourquoi, l'idée est ensuite de mettre en place un couplage entre le solveur CHARME et un solveur dédié à la phase dispersée. Nous retenons ici le solveur eulérien SPIREE plutôt que le solveur lagrangien SPARTE. Ce choix est justifié notamment par un couplage eulérien-eulérien qui semble plus naturel, entre autres raisons (voir le Tableau 3.4 au Chapitre 3). Cependant, des travaux similaires ont été engagés à l'ONERA sur la base du solveur SPARTE (ZUZIO et al. [309]), et une analyse comparative des deux approches devra être menée à terme.

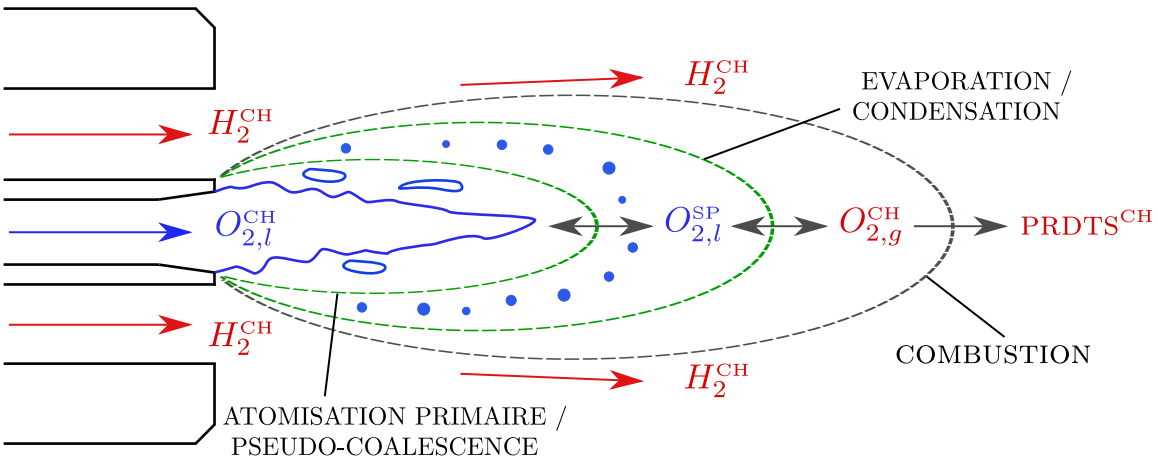


FIGURE 4.3 – ***Illustration de la stratégie de couplage CHARME-SPIREE sur la configuration MASCOTTE. Phase gazeuse en rouge, phase liquide en bleu. Exposant "CH" : solveur CHARME. Exposant "SP" : solveur SPIREE. Lignes pointillées vertes : couplages inter-solveurs.***

Le couplage a pour but de transférer la masse d'oxygène liquide du solveur CHARME vers le solveur SPIREE, c'est-à-dire d'une représentation "phases séparées" vers une représentation "phase dispersée". Il s'agit donc de mettre en place un ***modèle d'atomisation primaire***. Une fois transféré dans SPIREE, l'oxygène liquide est ainsi supposé se trouver sous forme de gouttes. Ces gouttes évoluent : elles sont transportées par la phase gazeuse du fluide, éventuellement se fragmentent, puis s'évaporent. L'évaporation n'est autre qu'un couplage en sens inverse, où le transfert de masse est effectué depuis SPIREE vers l'espèce oxygène gazeux de CHARME. A la fin de cette chaine de mécanismes, l'oxygène gazeux réagit avec l'hydrogène en générant des produits de combustion, ceci étant décrit au sein du solveur CHARME. L'ensemble de la stratégie de couplage CHARME-SPIREE appliquée à la configuration du banc Mascotte est illustrée schématiquement sur la Figure 4.3. Pour terminer, il convient de préciser que les couplages inter-solveurs, représentés par des lignes pointillées vertes sur la Figure 4.3, pourront en réalité se produire dans les deux sens. Ainsi, le transfert par évaporation de SPIREE vers CHARME pourrait très bien devenir un transfert par condensation de CHARME vers SPIREE, même si cela est probablement très

marginal dans une configuration telle que celle du banc Mascotte. De même, nous verrons qu'il existe un transfert de SPIREE vers l'espèce oxygène liquide de CHARME, que l'on désignera par l'appellation ***pseudo-coalescence***, et qui s'effectue en sens inverse du transfert par atomisation primaire.

Chapitre 5

Modélisation du fluide avec le solveur CHARME

Ce chapitre détaille la méthodologie retenue pour décrire le fluide avec le solveur CHARME du code CEDRE. L'appellation "fluide" désigne ici le mélange de deux phases séparées, l'une gazeuse et l'autre liquide. La phase gazeuse contient plusieurs espèces chimiques, qui peuvent être des espèces inertes, des réactifs ou des produits de la combustion H_2-O_2. La phase liquide n'est ici composée que d'une seule espèce, l'oxygène liquide sous sa forme dense. Du point de vue de la modélisation, nous adoptons l'approche à fluide homogène (ou modèle "à 4 équations"). Le comportement du fluide est ainsi régi par les équations de Navier-Stokes compressibles multi-espèces, où n'interviennent localement qu'une seule pression, vitesse et température pour l'ensemble du fluide. Nous avons vu au Chapitre 3 l'origine rigoureuse du modèle à 4 équations dans la hiérarchie des différents modèles pour les écoulements diphasiques. Dans ce chapitre, les équations du modèle sont réintroduites suivant une formulation classique multi-espèces "quasi-monophasique", l'espèce liquide n'étant qu'une espèce particulière du fluide.

Sommaire

5.1 Équations de Navier-Stokes compressibles multi-espèces . . . 81
5.1.1 Équations de conservation des espèces . . . 81
5.1.2 Équation de conservation de la quantité de mouvement . . . 82
5.1.3 Équation de conservation de l'énergie . . . 84
5.1.4 Formulation vectorielle . . . 84
5.2 Modélisation des flux de diffusion . . . 85
5.2.1 Nombres adimensionnels . . . 85
5.2.2 Diffusion des espèces . . . 85
5.2.3 Diffusion de la quantité de mouvement . . . 86
5.2.4 Diffusion de la chaleur . . . 87
5.3 Coefficients de transport . . . 87
5.3.1 Diffusivité . . . 87
5.3.2 Viscosité . . . 87
5.3.3 Conductivité thermique . . . 87
5.3.4 Grandeurs moyennes pour le fluide . . . 88
5.4 Modélisation de la turbulence . . . 88
5.4.1 Aspects théoriques : la cascade énergétique . . . 88
5.4.2 Stratégies pour la simulation numérique de la turbulence . . . 89
5.4.3 Filtrage des équations de conservation . . . 90
5.4.4 Fermeture des termes turbulents . . . 93
5.4.5 L'approche implicite de la turbulence . . . 95
5.5 Fermeture thermodynamique du système fluide . . . 96
5.5.1 Rappels de thermodynamique . . . 96
5.5.2 Changement de variables . . . 99
5.5.3 Modélisation thermodynamique de la phase gazeuse . . . 100

5.5.4 Modélisation thermodynamique de la phase liquide 101
5.5.5 Lois de mélange 104
5.5.6 Problèmes de robustesse liés à la fermeture thermodynamique du système fluide 106

5.1 Équations de Navier-Stokes compressibles multi-espèces

5.1.1 Équations de conservation des espèces

Conservation de la masse totale

Le principe de conservation de la masse stipule que la masse totale d'un système fermé est constante dans le temps. Autrement dit, la variation temporelle de la masse dans un système fluide ouvert ne peut être due qu'à la résultante des flux de masse à travers les frontières de celui-ci. En adoptant le point de vue eulérien, il est possible de traduire ce principe sous la forme d'une équation différentielle locale conservative, également connue sous le nom d'équation de continuité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u}) = 0 \,, \tag{5.1}$$

où ρ désigne la masse volumique locale du fluide, et $\boldsymbol{u}$ son vecteur vitesse. Dans le cadre de notre étude, la conservation de la masse totale est cependant à considérer de manière globale, c'est-à-dire en considérant notre système fermé comme l'union du fluide (espèces gazeuses + liquide dense) et de la phase liquide sous forme dispersée. A l'échelle du fluide et de ses équations de conservation, la masse totale n'est donc pas conservée :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u}) = S_M \,. \tag{5.2}$$

Évidemment, le terme source S_M doit se retrouver dans les équations de conservation de la phase dispersée affecté d'un signe opposé, si bien que la masse totale du système {fluide + phase dispersée} se conserve.

Conservation des espèces

Le fluide considéré est composé de $N_t = N_g + 1$ espèces, dont N_g espèces composent la phase gazeuse, et une espèce compose la phase liquide. Plus précisément, nous ordonnons les différentes espèces chimiques de la manière suivante :

$1 \leq i \leq N_g - 1$	espèce gazeuse quelconque
$i = N_g$	espèce oxygène gazeux $O_{2(g)}$
$i = N_t$	espèce oxygène liquide $O_{2(l)}$

(5.3)

Il n'est pas nécessaire à ce stade de préciser quelles sont les espèces gazeuses $1 \leq i \leq N_g - 1$, dans la mesure où celles-ci dépendent du choix retenu pour la modélisation de la combustion $H_2 - O_2$ (cf. § 7.3), et des éventuelles espèces inertes supplémentaires. Il est alors possible d'écrire une équation de conservation pour chaque espèce :

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_i \boldsymbol{u}) = -\nabla \cdot \boldsymbol{J}_i + \dot{\omega}_i + S^i_M \,, \qquad 1 \leq i \leq N_t \,, \tag{5.4}$$

où Y_i désigne la fraction massique de l'espèce i, $\boldsymbol{J}_i$ son flux de diffusion, $\dot{\omega}_i$ le terme source de réaction chimique, et S^i_M un terme source de couplage avec la phase dispersée. Cette formulation générique peut être précisée. Les termes sources chimiques ne concernent que les espèces gazeuses et pas l'espèce oxygène liquide $O_{2(l)}$. Les termes de couplage avec la phase dispersée ne concernent que les espèces chimiques composées d'oxygène : transfert de masse par atomisation et/ou pseudo-coalescence pour $O_{2(l)}$ (cf. Chapitre 10) et transfert par évaporation-condensation pour $O_{2(g)}$ (cf. § 7.1.2). Nous allons alors noter S^g_M le terme source de couplage avec la phase dispersée apparaissant dans l'équation de l'espèce $O_{2(g)}$, et S^l_M son équivalent dans l'équation de l'espèce $O_{2(l)}$. Il vient donc :

$$\begin{array}{lcll}
\dfrac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_i \boldsymbol{u}) = -\nabla \cdot \boldsymbol{J}_i + \dot{\omega}_i & & & 1 \leq i \leq N_g - 1 \\
\dfrac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_i \boldsymbol{u}) = -\nabla \cdot \boldsymbol{J}_i + \dot{\omega}_i + S^g_M & & & i = N_g \\
\dfrac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_i \boldsymbol{u}) = -\nabla \cdot \boldsymbol{J}_i + S^l_M & & & i = N_t
\end{array} \tag{5.5}$$

Remarquons que si l'on somme les équations de conservation de toutes les espèces, il vient

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \, \boldsymbol{u}) = -\nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^{N_t} \boldsymbol{J}_i \right) + \sum_{i=1}^{N_t} \dot{\omega}_i + S_M^g + S_M^l \, . \tag{5.6}$$

On retrouve ainsi l'équation de conservation de la masse totale du fluide (5.2) sous les conditions suivantes :

(i) la somme des flux de diffusion moléculaire des espèces est nulle :

$$\sum_{i=1}^{N_t} \boldsymbol{J}_i = \boldsymbol{0} \, . \tag{5.7}$$

(ii) la somme des termes sources chimiques est nulle :

$$\sum_{i=1}^{N_t} \dot{\omega}_i = 0 \, . \tag{5.8}$$

(iii) la somme des termes de transfert de masse avec la phase dispersée est notée S_M :

$$S_M^g + S_M^l = S_M \, . \tag{5.9}$$

5.1.2 Équation de conservation de la quantité de mouvement

L'équation de conservation de la quantité de mouvement d'un fluide s'obtient par application de la seconde loi de Newton. Dans un référentiel galiléen, la variation de la quantité de mouvement d'un système est égale à la résultante des forces qui lui sont appliquées. Dans le cas d'un fluide, on distingue les forces à distance volumiques (gravité, electromagnétisme), et les forces de contact surfaciques (pression, frottements). Dans le cas général, on écrira alors l'équation de conservation de la quantité de mouvement sous la forme

$$\frac{\partial \rho \boldsymbol{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u}) = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{f} \, , \tag{5.10}$$

où $\boldsymbol{f}$ désigne les forces volumiques et $\boldsymbol{\sigma}$ le tenseur des contraintes de Cauchy. Ce tenseur peut se décomposer en la somme d'un tenseur sphérique (isotrope) et d'un tenseur déviateur (anisotrope) de trace nulle :

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}' + \boldsymbol{\sigma}'' \, . \tag{5.11}$$

Par définition, la partie isotrope du tenseur de Cauchy s'écrit

$$\boldsymbol{\sigma}' = \frac{1}{3} tr(\boldsymbol{\sigma}) \boldsymbol{I} = -P \boldsymbol{I} \, , \tag{5.12}$$

où $\boldsymbol{I}$ désigne la matrice identité, et où la trace du tenseur de Cauchy $tr(\boldsymbol{\sigma})$ (somme de ses termes diagonaux) représente l'effet des contraintes normales, et par conséquent s'identifie à la pression P. La partie anisotrope (déviateur) du tenseur de Cauchy regroupe les contraintes de cisaillement visqueux, notées $\boldsymbol{\tau}$. Ainsi, on écrit classiquement le tenseur des contraintes en fonction de la pression et des contraintes visqueuses :

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\tau} - P \boldsymbol{I} \, . \tag{5.13}$$

Par ailleurs, de la même manière que pour la conservation de la masse, il doit apparaitre ici un terme source de transfert de quantité de mouvement par couplage avec la phase dispersée, que l'on note $\boldsymbol{S_U}$. L'équation de conservation de la quantité de mouvement du fluide s'écrit alors :

$$\frac{\partial \rho \boldsymbol{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u}) = \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} - P \boldsymbol{I}) + \boldsymbol{f} + \boldsymbol{S_U} \, . \tag{5.14}$$

Modélisation de la tension de surface

La tension de surface joue un rôle prépondérant dans les mécanismes de rupture de jets liquides et de formation de gouttes. Il s'agit de la force stabilisatrice qui donne leur forme sphérique aux gouttes et stoppe le processus de fragmentation. Ainsi, l'effet de la tension de surface se fait davantage ressentir aux petites échelles, lorsqu'elle

devient comparable aux forces d'inertie. En d'autres termes, cela signifie qu'à grande échelle (à l'échelle de l'écoulement moyen), un nombre de Weber très grand induit une influence de la tension de surface négligeable [1]. C'est typiquement le cas de la configuration du banc Mascotte qui nous intéresse (cf. § 2.3.4). Cependant, nous visons des simulations aux grandes échelles sur la configuration Mascotte, et il n'est pas impossible que la prise en compte de la capillarité ait un impact sur la forme des structures que l'on pourrait être amené à capter avec un maillage fin. C'est pourquoi, nous intégrons dans cette étude une modélisation des forces capillaires décrivant la tension de surface.

Comme expliqué au Chapitre 3, le modèle à fluide homogène fait partie des approches ***à interface diffuse*** pour décrire l'écoulement diphasique. Cela signifie que la position de l'interface entre les phases n'est pas captée à l'échelle de sous-maille, contrairement aux méthodes à ***capture d'interface*** (Level Set, Volume of Fluid avec reconstruction d'interface). Cependant, il est tout de même possible de prendre en compte l'effet de la tension de surface. Pour cela, l'approche CSF (Continuum Surface Force) de BRACKBILL et al. [28] est utilisée. Le rapport technique ZUZIO et al. [308] détaille les modalités d'implantation de ce modèle dans le solveur CHARME. Dans cette approche, les forces capillaires sont représentées par une densité volumique de force $\boldsymbol{F}^c$ au second membre de l'équation de conservation de la quantité de mouvement. Dans le cas où l'interface serait capturée et où seraient donc connues en tout point sa courbure κ et sa normale $\boldsymbol{n}_I$, cette densité volumique de force s'écrirait simplement :

$$\boldsymbol{F}^c = \sigma\kappa\delta_I\boldsymbol{n}_I \,, \tag{5.15}$$

où δ_I est la distribution de Dirac portée par l'interface, et σ le coefficient de tension de surface. En revanche, dans le cas où l'interface est diffuse, on ne connait *a priori* ni sa courbure ni sa normale. Ces grandeurs sont alors modélisées comme

$$\delta_I\boldsymbol{n}_I \approx \nabla\alpha \qquad ; \qquad \kappa \approx \nabla\cdot\left(\frac{\nabla\alpha}{||\nabla\alpha||}\right) , \tag{5.16}$$

où α désigne la fraction volumique de phase et $\nabla\alpha$ son gradient, dont les valeurs sont celles moyennées dans la maille, et dont le calcul ne nécessite pas la connaissance précise de la position de l'interface. On notera que dans le cas purement diphasique qui nous intéresse, il n'est pas utile de définir une fraction volumique par phase. De plus, dans le cadre du formalisme LHF, la fraction volumique n'est pas une variable indépendante du système fluide. La phase liquide étant mono-espèce, sa fraction volumique est liée à la masse volumique ρ du fluide (quantité conservée), à la masse volumique $\rho_l(P,T)$ de l'espèce liquide pure aux pression et température du fluide, et à la fraction massique Y_{N_l} de l'espèce liquide par la relation

$$\alpha = \frac{\rho Y_{N_l}}{\rho_l(P,T)} \,. \tag{5.17}$$

L'expression $\rho_l(P,T)$ n'est autre que la loi d'état utilisée pour décrire l'oxygène liquide (cf. § 5.5.4). Par ailleurs, il existe une formulation équivalente des forces capillaires sous la forme de la divergence d'un tenseur :

$$\boldsymbol{F}^c = -\nabla\cdot\boldsymbol{\tau}_c \,, \tag{5.18}$$

où $\boldsymbol{\tau}_c$ est le tenseur des contraintes capillaires, d'expression :

$$\boldsymbol{\tau}_c = \sigma||\nabla\alpha||\left(\boldsymbol{I} - \frac{\nabla\alpha}{||\nabla\alpha||}\otimes\frac{\nabla\alpha}{||\nabla\alpha||}\right) . \tag{5.19}$$

Cette formulation conservative est appelée CSS (Continuum Surface Stress). A noter que pour les cas multiphasiques (nombre de phases strictement supérieur à 2), ce tenseur peut être écrit de manière plus générale à partir de la densité d'énergie libre capillaire (voir ZUZIO et al. [308]).

Forme finale de l'équation de conservation de la quantité de mouvement

Il est courant d'écrire le terme en gradient de pression au membre de gauche de l'équation de conservation. Si en outre, on ajoute le tenseur des contraintes capillaires, et que la gravité est la seule force volumique prise en compte, on peut alors réécrire l'équation de conservation de la quantité de mouvement (5.14) sous la forme suivante :

$$\boxed{\frac{\partial\rho\boldsymbol{u}}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho\boldsymbol{u}\otimes\boldsymbol{u} + P\boldsymbol{I}) = \nabla\cdot(\boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau}_c) + \rho\boldsymbol{g} + \boldsymbol{S}_U \,.} \tag{5.20}$$

1. De manière analogue en turbulence, l'effet de la viscosité sur l'écoulement moyen est négligeable à grand nombre de Reynolds, mais devient sensible aux petites échelles, où l'énergie turbulente est dissipée.

5.1.3 Équation de conservation de l'énergie

L'énergie totale du fluide est la somme de son énergie interne e et de son énergie cinétique :

$$e_t = e + \frac{1}{2}\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{u}\,. \tag{5.21}$$

Des lois d'état thermodynamiques sont nécessaires pour relier l'énergie interne des espèces aux variables d'état du fluide (pression et température). Ces lois, dépendantes de la nature physique des différentes espèces (gaz parfait, liquide...), sont explicitées en § 5.5. L'équation de conservation de l'énergie totale s'écrit :

$$\boxed{\frac{\partial \rho e_t}{\partial t} + \nabla\cdot\Big[(\rho e_t + P)\boldsymbol{u}\Big] = \nabla\cdot\Big[(\boldsymbol{\tau}-\boldsymbol{\tau}_c)\cdot\boldsymbol{u}\Big] - \nabla\cdot\boldsymbol{J}_{e_t} + \rho\boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{u} + S_E\,,} \tag{5.22}$$

où $\boldsymbol{J}_{e_t}$ est le flux d'énergie totale, donné par :

$$\boldsymbol{J}_{e_t} = \boldsymbol{q} + \sum_{i=1}^{N_t} h_i \boldsymbol{J}_i\,, \tag{5.23}$$

avec $\boldsymbol{q}$ le flux de diffusion de la chaleur (voir § 5.2.4), et $h_i(P,T)$ l'enthalpie de l'espèce i. Le terme S_E désigne le terme source d'énergie lié aux échanges avec la phase dispersée.

5.1.4 Formulation vectorielle

Nous réécrivons ici sous forme vectorielle les équations de conservation introduites précédemment, de manière à faciliter l'écriture des méthodes numériques qui seront appliquées par la suite (cf. Chapitre 8).

Variables d'état et quantités conservées

Nous avons établi les équations de conservation qui régissent l'évolution de la masse, la quantité de mouvement et l'énergie du fluide. Ces quantités conservées peuvent être regroupées sous la forme d'un vecteur noté $\boldsymbol{Q}$:

$$\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{U}) = \begin{pmatrix}\rho Y_1 & \dots & \rho Y_{N_g} & \rho Y_{N_t} & \rho\boldsymbol{u} & \rho e_t\end{pmatrix}^t\,, \qquad \rho = \sum_{i=1}^{N_t}\rho Y_i\,, \tag{5.24}$$

où $\boldsymbol{U}$ est défini comme le vecteur des variables naturelles :

$$\boldsymbol{U}(\boldsymbol{Q}) = \begin{pmatrix}P & T & \boldsymbol{u} & Y_1 & \dots & Y_{N_g} & Y_{N_t}\end{pmatrix}^t\,, \qquad \sum_{i=1}^{N_t} Y_i = 1\,. \tag{5.25}$$

Il existe un changement de variable bijectif qui permet d'obtenir un jeu de variables par rapport à l'autre, dépendant notamment des lois d'état thermodynamiques (cf. § 5.5.2).

Flux et termes sources

Commençons par introduire le vecteur des flux convectifs $\boldsymbol{F_C}$ et le vecteur des flux diffusifs $\boldsymbol{F_D}$:

$$\boldsymbol{F_C} = \begin{pmatrix}\rho Y_1\boldsymbol{u}\\ \dots\\ \rho Y_{N_g}\boldsymbol{u}\\ \rho Y_{N_t}\boldsymbol{u}\\ \rho\boldsymbol{u}\otimes\boldsymbol{u} + P\boldsymbol{I}\\ (\rho e_t + P)\boldsymbol{u}\end{pmatrix} = \boldsymbol{Q}\otimes\boldsymbol{u} + P\begin{pmatrix}0\\ \dots\\ 0\\ 0\\ \boldsymbol{I}\\ \boldsymbol{u}\end{pmatrix}, \tag{5.26}$$

$$\boldsymbol{F_D} = \begin{pmatrix}-\boldsymbol{J}_1\\ \dots\\ -\boldsymbol{J}_{N_g}\\ -\boldsymbol{J}_{N_t}\\ \boldsymbol{\tau}-\boldsymbol{\tau}_c\\ (\boldsymbol{\tau}-\boldsymbol{\tau}_c)\cdot\boldsymbol{u} - \boldsymbol{J}_{e_t}\end{pmatrix}. \tag{5.27}$$

On définit ensuite le vecteur $\boldsymbol{S}$ des termes sources, qui peut être décomposé en trois parties : les termes de couplage avec la phase dispersée, regroupés dans un vecteur noté $\boldsymbol{S_{FD}}$, les termes sources internes au fluide liés

à la gravité, regroupés dans le vecteur $\boldsymbol{S_G}$, et les termes sources chimiques (internes au fluide), regroupés dans un vecteur noté $\boldsymbol{S_\omega}$. Nous avons donc :

$$\boldsymbol{S} = \begin{pmatrix} 0 & + & \dot{\omega}_1 \\ & \dots & \\ S_M^g & + & \dot{\omega}_{N_g} \\ S_M^l & + & 0 \\ \boldsymbol{S_U} & + & \rho \boldsymbol{g} \\ S_E & + & \rho \boldsymbol{g} \cdot \boldsymbol{u} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \dots \\ S_M^g \\ S_M^l \\ \boldsymbol{S_U} \\ S_E \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ \dots \\ 0 \\ 0 \\ \rho \boldsymbol{g} \\ \rho \boldsymbol{g} \cdot \boldsymbol{u} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \dot{\omega}_1 \\ \dots \\ \dot{\omega}_{N_g} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \boldsymbol{S_{FD}} + \boldsymbol{S_G} + \boldsymbol{S_\omega} . \tag{5.28}$$

Système des équations de conservation

Avec les notations précédemment introduites, le système des équations de conservation instantanées du fluide s'écrit sous la forme vectorielle suivante :

$$\boxed{\frac{\partial \boldsymbol{Q}}{\partial t} + \nabla . \boldsymbol{F_C} = \nabla . \boldsymbol{F_D} + \boldsymbol{S} .} \tag{5.29}$$

Afin d'assurer la fermeture de ce système, il nous reste à détailler l'expression des flux diffusifs (cf. § 5.2) et des termes sources (voir le Chapitre 7), et à introduire les lois d'état thermodynamiques qui définissent le changement de variables $\boldsymbol{U}(\boldsymbol{Q}) \leftrightarrow \boldsymbol{Q}(\boldsymbol{U})$ (cf. § 5.5). Il est également nécessaire de préciser les opérations de prise de moyenne ou de filtrage qu'il est possible d'appliquer à ce système pour prendre en compte la turbulence (cf. § 5.4).

5.2 Modélisation des flux de diffusion

5.2.1 Nombres adimensionnels

L'importance relative des transferts par diffusion de la masse, de la quantité de mouvement (viscosité) et de la chaleur, est caractérisée par les nombres adimensionnels de Prandtl, Schmidt et Lewis, dont les définitions sont les suivantes :

$$\begin{aligned} \mathrm{Pr} &= \frac{\nu}{\alpha} = \frac{\textbf{\textit{diffusion visqueuse}}}{\textbf{\textit{diffusion de la chaleur}}} , \\ \mathrm{Sc} &= \frac{\nu}{\mathcal{D}} = \frac{\textbf{\textit{diffusion visqueuse}}}{\textbf{\textit{diffusion moléculaire}}} , \\ \mathrm{Le} &= \frac{\alpha}{\mathcal{D}} = \frac{\textbf{\textit{diffusion de la chaleur}}}{\textbf{\textit{diffusion moléculaire}}} . \end{aligned} \tag{5.30}$$

Ici, ν, $\mathcal{D}$ et α désignent respectivement la viscosité cinématique, la diffusivité massique, et la diffusivité thermique, toutes exprimées en m^2/s. La diffusivité thermique s'écrit par ailleurs :

$$\alpha = \frac{\lambda}{\rho \, c_p} , \tag{5.31}$$

où λ représente la conductivité thermique, exprimée en W/(m.K), et c_p désigne la capacité calorifique massique à pression constante, exprimée en J/(kg.K). Enfin, ces trois nombres vérifient la relation suivante :

$$\mathrm{Pr} = \frac{\mathrm{Sc}}{\mathrm{Le}} . \tag{5.32}$$

5.2.2 Diffusion des espèces

Loi de Fick

La loi de Fick est une modélisation classique qui exprime les vitesses de diffusion des espèces en fonction de leur gradient de concentration :

$$\mathcal{V}_i = -\mathcal{D}_i \frac{\nabla Y_i}{Y_i} . \tag{5.33}$$

Les flux de diffusion s'écrivent alors selon la relation

$$\boldsymbol{J}_i = \rho Y_i \mathcal{V}_i = -\rho \mathcal{D}_i \nabla Y_i \,, \tag{5.34}$$

où l'on note que le gradient de température n'intervient pas, ce qui revient à négliger l'effet Soret (thermophorèse).

Suppression des flux de diffusion moléculaire entre phases

Un traitement spécifique est nécessaire afin de respecter l'absence de diffusion moléculaire entre les phases. En effet, rappelons que nous considérons un fluide constitué de deux phases séparées, théoriquement non miscibles : une phase gazeuse multi-espèces et une phase liquide mono-espèce. Aussi, la diffusion moléculaire est un phénomène qui se produit entre les différentes espèces de la phase gazeuse, mais qui ne doit pas intervenir entre les espèces gazeuses et la phase liquide. Si les deux phases se retrouvent intimement mélangées en sous-maille au cours du calcul, c'est uniquement de manière artificielle en raison de la diffusion numérique.

Des développements ont ainsi été réalisés dans le solveur CHARME afin que les flux de diffusion dans les équations de conservation des espèces correspondent bien à de la diffusion au sein de la phase à laquelle elles sont affectées. En pratique, une manière générique de procéder consiste à utiliser des gradients de ***fractions massiques par phases*** pour le calcul des flux de diffusion :

$$\boldsymbol{J}_i = -\rho \mathcal{D}_i \nabla Y_{p,i} \,, \tag{5.35}$$

où $Y_{p,i}$ désigne la fraction massique de l'espèce i dans sa propre phase, et non sa fraction massique par rapport à l'ensemble du fluide, toutes phases confondues. Pour l'espèce oxygène liquide, par exemple, unique constituant de la phase liquide, cette grandeur vaut toujours 1. Par conséquent son gradient est toujours nul, et il en est de même pour son flux de diffusion moléculaire. Cependant, pour des raisons d'architecture de code, les gradients de fractions massiques calculés dans le solveur CHARME utilisent toujours les fractions massiques Y_i des espèces ***par rapport à l'ensemble du fluide***. Heureusement, il est possible de remonter au gradient de la fraction massique par phase grâce à la relation suivante :

$$\nabla Y_{p,i} = \sum_{j=1}^{N_t} \nabla Y_j \frac{\partial Y_{p,i}}{\partial Y_j} \,. \tag{5.36}$$

Il reste à calculer la dérivée de $Y_{p,i}$ par rapport à Y_j. Pour cela, introduisons le "poids" Π_x d'une phase x quelconque constituée de N_x espèces :

$$\Pi_x = \sum_{i=1}^{N_x} Y_i \,. \tag{5.37}$$

Dans notre cas, et avec les notations adoptées jusqu'à maintenant, les poids des phases gazeuse et liquide, notés respectivement Π_g et Π_l, s'écrivent :

$$\Pi_g = \sum_{i=1}^{N_g} Y_i \,, \qquad \Pi_l = Y_{N_t} \,. \tag{5.38}$$

On définit alors la fraction massique de chaque espèce relativement à sa phase comme :

$$Y_{p,i} = \frac{Y_i}{\Pi_x} \,, \qquad x = g \text{ ou } x = l \,. \tag{5.39}$$

Il vient ensuite par un simple calcul :

$$\frac{\partial Y_{p,i}}{\partial Y_i} = \frac{\Pi_x - Y_i}{\Pi_x^2} = \frac{1 - Y_{p,i}}{\Pi_x} \,, \qquad \left(\frac{\partial Y_{p,i}}{\partial Y_j}\right)_{\substack{j\neq i \\ j\in x}} = -\frac{Y_i}{\Pi_x^2} = -\frac{Y_{p,i}}{\Pi_x} \,, \qquad \left(\frac{\partial Y_{p,i}}{\partial Y_j}\right)_{\substack{j\neq i \\ j\notin x}} = 0 \,. \tag{5.40}$$

5.2.3 Diffusion de la quantité de mouvement

La majorité des fluides usuels satisfait à l'hypothèse de fluide newtonien, selon laquelle le tenseur des contraintes visqueuses $\boldsymbol{\tau}$ est proportionnel à la partie symétrique du tenseur des taux de déformation, notée $\boldsymbol{S}$ (voir l'Annexe C pour l'expression de ce tenseur), selon la relation

$$\boldsymbol{\tau} = 2\mu \boldsymbol{S} + \eta (\nabla \cdot \boldsymbol{u}) \boldsymbol{I} \,, \tag{5.41}$$

où μ désigne la viscosité dynamique du fluide et η sa viscosité de volume. En faisant l'hypothèse de Stokes qui permet de relier ces deux termes :

$$3\eta + 2\mu = 0, \tag{5.42}$$

le tenseur des contraintes visqueuses peut s'écrire comme

$$\boldsymbol{\tau} = 2\mu\left[\boldsymbol{S} - \frac{1}{3}(\nabla\cdot\boldsymbol{u})\boldsymbol{I}\right] = 2\mu\boldsymbol{D}\,, \tag{5.43}$$

où

$$\boldsymbol{D} = \boldsymbol{S} - \frac{1}{3}(\nabla\cdot\boldsymbol{u})\boldsymbol{I} = \boldsymbol{S} - \frac{1}{3}tr(\boldsymbol{S})\boldsymbol{I}\,, \tag{5.44}$$

est le déviateur de la partie ***symétrique*** du tenseur des taux de déformations (cf. Annexe C).

5.2.4 Diffusion de la chaleur

La diffusion de la chaleur est supposée suivre la loi de Fourier :

$$\boldsymbol{q} = -\lambda\nabla T\,, \tag{5.45}$$

où λ désigne la conductivité thermique du fluide. L'effet Dufour, qui traduit l'effet des flux de diffusion moléculaires sur le flux de chaleur, est ainsi négligé.

5.3 Coefficients de transport

5.3.1 Diffusivité

Les coefficients de diffusion des espèces, qu'elles soient gazeuses ou liquide, sont exprimés selon l'approximation suivante :

$$\mathcal{D}_i = \frac{\nu_{ph}}{\mathrm{Sc}_i} = \frac{\rho_{ph}\mu_{ph}}{\mathrm{Sc}_i}\,, \tag{5.46}$$

où ν_{ph} et μ_{ph} sont les viscosités (cinématique et dynamique) moyennes pour une phase donnée, et où Sc_i est le nombre de Schmidt renseigné pour l'espèce i. Rappelons toutefois, comme expliqué en § 5.2.2, qu'un traitement particulier est réalisé de manière à ce que les espèces ne diffusent qu'au sein de la phase à laquelle elles sont affectées. Le flux de diffusion de l'espèce oxygène liquide, seule dans la phase liquide, sera donc toujours nul et par conséquent la modélisation de sa diffusivité est sans importance.

5.3.2 Viscosité

Espèces gazeuses

La viscosité des espèces gazeuses est supposée suivre la loi de SUTHERLAND [264]. Elle dépend ainsi de trois paramètres, à savoir une viscosité de référence $\mu_{0,i}$, une température de référence $T_{s,i}$ ainsi que le paramètre S_i, dit "température de Sutherland" :

$$\mu_i(T) = \mu_{0,i}\left(\frac{T}{T_{s,i}}\right)^{3/2}\frac{T_{s,i}+S_i}{T+S_i}\,. \tag{5.47}$$

Espèce liquide

Dans le cas général, la viscosité des liquides peut être modélisée par un polynôme de la température. On trouve par exemple la loi de Yaws (KUO [161]) :

$$\mu(T) = 0,001\exp\left(\mu_A + \mu_B/T + \mu_C T + \mu_D T^2\right)\,. \tag{5.48}$$

Les constantes μ_A, μ_B, μ_C, et μ_D sont issues de données expérimentales.

5.3.3 Conductivité thermique

Espèces gazeuses

La conductivité des espèces gazeuses suit la loi d'Eucken ci-dessous, où $r_i = R/M_i$ désigne le facteur de volume de l'espèce i :

$$\lambda_i(T) = \mu_i(T)\left[c_{p,i}(T) + \frac{5}{4}r_i\right]\,. \tag{5.49}$$

Espèce liquide

Comme la viscosité, la conductivité thermique des liquides peut être décrite par un polynôme de la température, selon la loi de Miller (KUO [161]) :

$$\lambda(T) = \max\left(\lambda_{min}, \lambda_A + \lambda_B T + \lambda_C T^2\right) . \tag{5.50}$$

De même, les coefficients du polynôme sont issus de données expérimentales.

5.3.4 Grandeurs moyennes pour le fluide

Certains coefficients de transport introduits précédemment, dont on a donné une modélisation propre à chaque espèce, doivent ensuite être moyennés à l'échelle du fluide. C'est le cas de la viscosité et de la conductivité thermique. Pour cela, nous utilisons une simple moyenne pondérée par la masse de chaque espèce :

$$\varphi(T) = \sum_{i=1}^{N_t} Y_i \varphi_i(T) , \tag{5.51}$$

où φ peut désigner la viscosité ou la conductivité thermique.

5.4 Modélisation de la turbulence

Nous présentons ici de manière succincte et non exhaustive la phénoménologie de la turbulence, ainsi que les différentes approches disponibles pour la décrire numériquement. Davantage de détails sur la turbulence sont disponibles dans les ouvrages de référence de POPE [215], LESIEUR [176] et BATCHELOR [15], ou encore dans les deux ouvrages en français de BAILLY et COMTE-BELLOT [12] et SCHIESTEL [242].

5.4.1 Aspects théoriques : la cascade énergétique

Le qualificatif de "turbulent" (par opposition à "laminaire") désigne la propension que possède un écoulement à se déstabiliser et à développer des tourbillons en son sein. Le développement éventuel de la turbulence dépend de certaines propriétés physiques du fluide, telles la densité et la viscosité, mais également de paramètres indépendants de sa nature physique, comme la vitesse et la configuration géométrique de l'écoulement. Le nombre de Reynolds permet de déterminer si un écoulement est enclin à présenter un caractère laminaire ou turbulent. Il est défini par la relation

$$\mathrm{Re} = \frac{UL}{\nu} = \frac{\textbf{\textit{inertie}}}{\textbf{\textit{viscosité}}} = \frac{\textbf{\textit{transport convectif de la QDM}}}{\textbf{\textit{diffusion de la QDM}}} , \tag{5.52}$$

où L et U désignent respectivement une longueur et une vitesse caractéristiques de l'écoulement, ν étant la viscosité cinématique du fluide. Le nombre de Reynolds compare ainsi les forces d'inertie non-linéaires et déstabilisatrices aux forces de diffusion visqueuse stabilisatrices. Un écoulement à fort nombre de Reynolds a donc vocation à se déstabiliser et à présenter un caractère turbulent, tandis qu'un écoulement à faible Reynolds aura un caractère laminaire. D'un point de vue mathématique, la turbulence provient du caractère fortement non-linéaire des équations de Navier-Stokes, en particulier du terme d'accélération convective. Elle se caractérise également par une fluctuation dans l'espace et dans le temps des différentes grandeurs physiques de l'écoulement.

Selon la théorie classique de la cascade de RICHARDSON [230], reprise par KOLMOGOROV [160], un écoulement turbulent présente un caractère fortement multi-échelles. Ces échelles peuvent être réparties en trois zones différentes dans l'espace spectral, représentées sur le schéma de la Figure 5.1 :

(i) Les plus gros tourbillons, dont la taille caractéristique $\mathcal{L}$ est nommée "échelle intégrale", puisent l'énergie cinétique de l'écoulement moyen, et définissent la ***zone de production*** de l'énergie cinétique turbulente.

(ii) Cette énergie est ensuite transférée vers des échelles de plus en plus petites dans la ***zone inertielle***. Pour une turbulence homogène isotrope, on peut montrer que la densité spectrale d'énergie décroit dans cette zone de manière universelle en $\log E(\kappa) \propto (\log \kappa)^{-5/3}$, où κ désigne le nombre d'onde.

(iii) Sous l'effet de la viscosité, l'énergie des plus petits tourbillons, dont la taille caractéristique η_K est nommée "échelle de Kolmogorov", est finalement dissipée sous forme de chaleur dans la ***zone dissipative***.

L'étendue du spectre de l'énergie turbulente est fonction du nombre de Reynolds lié à l'échelle intégrale, $\mathrm{Re}_{\mathcal{L}} = U_{\mathcal{L}}\mathcal{L}/\nu$, où $U_{\mathcal{L}}$ est la vitesse caractéristique des structures de la taille de l'échelle intégrale $\mathcal{L}$. En effet, il

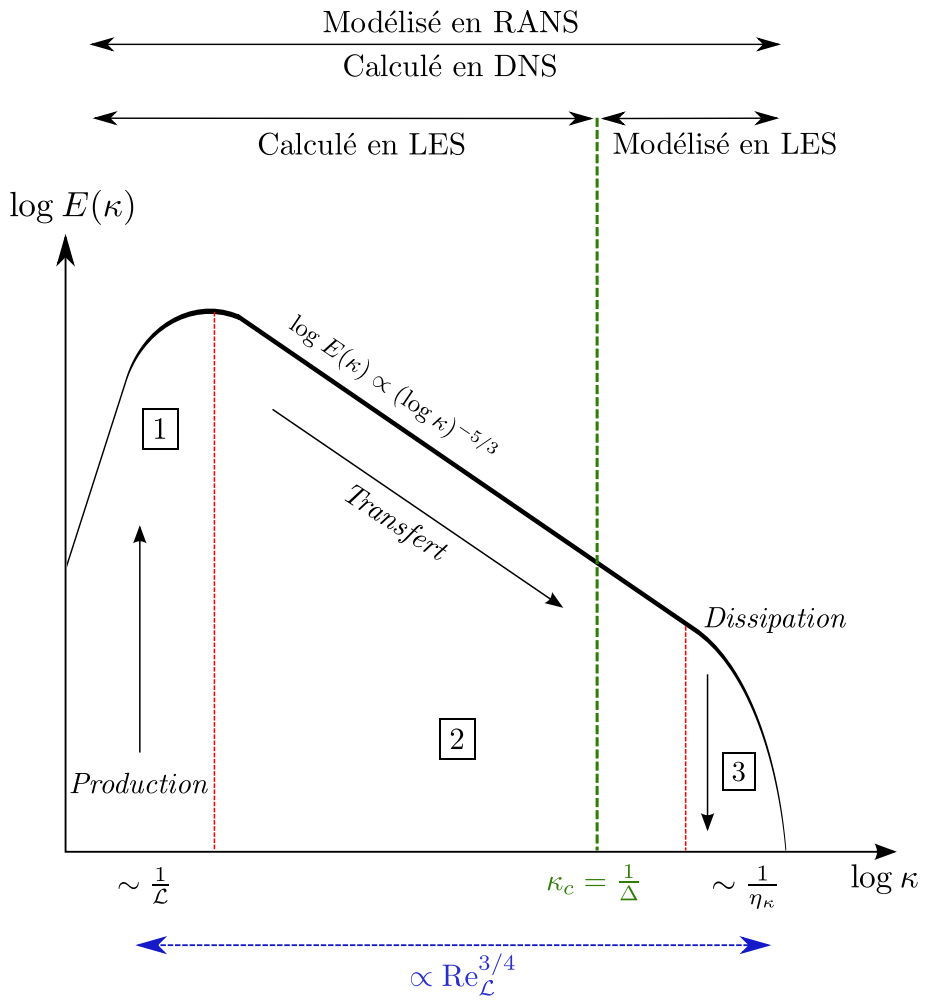


FIGURE 5.1 – ***Représentation schématique de la cascade énergétique et des approches DNS, LES et RANS.***

est possible de démontrer la relation suivante entre l'échelle intégrale et celle de Kolmogorov :

$$\frac{\eta_K}{\mathcal{L}} \propto \mathrm{Re}_{\mathcal{L}}^{-3/4}. \tag{5.53}$$

Pour une échelle intégrale $\mathcal{L}$ donnée, la taille η_K des plus petites structures de l'écoulement est donc d'autant plus petite que le nombre de Reynolds basé sur l'échelle intégrale est grand. Par ailleurs, la théorie de la cascade directe ne prévoit pas l'existence d'un transfert inverse d'énergie ("backscatter"), des petites échelles vers les grandes. Néanmoins, des études récentes ont montré que ce transfert inverse existe, occasionné par des processus d'appariement et d'enroulement tourbillonnaires. Son intensité reste toutefois inférieure à celle du transfert direct.

5.4.2 Stratégies pour la simulation numérique de la turbulence

La simulation numérique des écoulements turbulents nécessite de prendre en compte l'ensemble du spectre des échelles de la turbulence. Pour cela, il existe principalement trois approches différentes (cf. Figure 5.1) :

- la **Simulation Numérique Directe** (ou **DNS** pour Direct Numerical Simulation) s'attache à résoudre toutes les échelles spatiales de l'écoulement (MOIN et MAHESH [195]). Elle présente ainsi le grand avantage de ne nécessiter aucune modélisation. Néanmoins, un maillage suffisamment fin est requis de manière à capter les structures jusqu'à l'échelle de Kolmogorov. De même, la résolution temporelle doit être suffisamment fine pour capter la dynamique des plus petites structures. Pour ces deux raisons, la DNS est une approche extrêmement coûteuse, aussi bien en temps de calcul qu'en occupation mémoire. Elle reste ainsi principalement limitée à des applications académiques, de taille réduite et à nombre de Reynolds modéré. Avec l'augmentation constante des capacités de calcul, ce type d'approche a cependant vocation à se démocratiser.
- la **Simulation aux Grandes Échelles** (ou **LES** pour Large Eddy Simulation) résout les structures dont la taille est comprise entre l'échelle intégrale $\mathcal{L}$ et une échelle de coupure κ_c située dans la zone inertielle. Il

s'agit ainsi d'appliquer un filtre passe-bas dans l'espace spectral (ou filtre passe-haut dans l'espace physique). Les échelles inférieures à l'échelle de coupure sont nommées "échelles de sous-maille". Elles ne sont pas résolues, et leur effet sur les grandes échelles doit être modélisé.

– l'approche **RANS** (pour Reynolds Averaged Navier Stokes) décrit l'écoulement de manière statistique. Les variables de l'écoulement sont décomposées en une composante moyenne et une composante fluctuante, selon l'approche de Reynolds. Les équations de conservation portent sur les grandeurs moyennes, tandis que l'influence des fluctuations sur les grandeurs moyennes fait l'objet d'une modélisation.

La différence entre ces trois approches est illustrée par la Figure 5.2, où est représentée de manière schématique l'évolution temporelle d'une variable quelconque de l'écoulement en un point de l'espace donné.

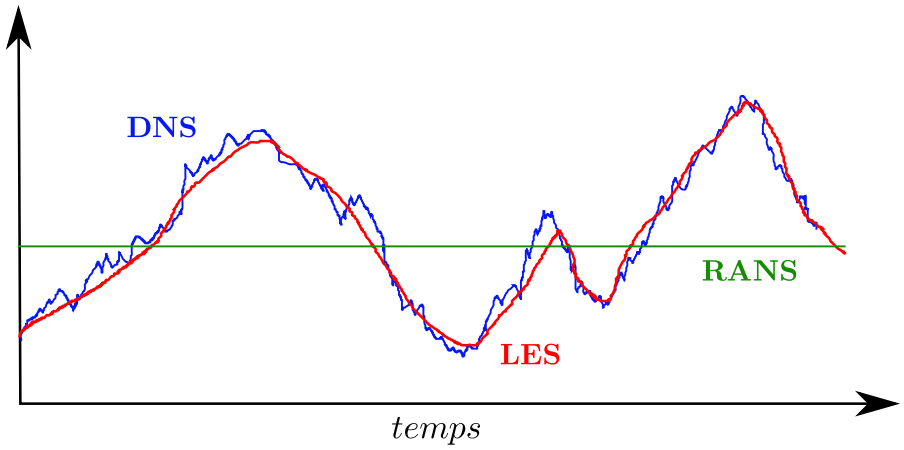


FIGURE 5.2 – *Signal temporel d'une variable quelconque de l'écoulement en un point de l'espace, suivant les approches RANS, LES et DNS.*

5.4.3 Filtrage des équations de conservation

Quelle que soit l'approche utilisée (RANS ou LES), il est possible de décomposer chaque variable ϕ de l'écoulement en la somme de deux contributions :

$$\phi = \overline{\phi} + \phi' \,, \tag{5.54}$$

où $\overline{\phi}$ et ϕ' désignent la valeur moyenne et la fluctuation dans le cas de l'approche RANS, et la partie résolue et la partie non-résolue en LES. Cette décomposition, nommée décomposition de Reynolds, s'avère mal adaptée aux cas où la masse volumique ρ est variable. En effet, elle fait alors apparaitre des corrélations difficiles à modéliser dans les équations. Il est possible d'éviter ces corrélations en adoptant plutôt la décomposition de FAVRE [92], où la moyenne est pondérée par la masse volumique :

$$\phi = \widetilde{\phi} + \phi'' \,, \qquad \widetilde{\phi} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\overline{\rho}} \,. \tag{5.55}$$

Filtrage RANS

L'approche RANS consiste à appliquer une moyenne statistique d'ensemble $\overline{\bullet}$ aux équations de Navier-Stokes. Opportunément, cette moyenne peut être assimilée à une moyenne temporelle grâce à l'hypothèse d'ergodicité. L'opérateur de moyenne possède des propriétés mathématiques utiles au développement des équations moyennées : il est linéaire, commute par rapport aux dérivées, conserve les constantes, et est idempotent. Ces propriétés se traduisent par les relations suivantes :

$$\overline{\overline{\phi}} = \overline{\phi} \,, \qquad \overline{\phi'} = 0 \,. \tag{5.56}$$

La prise de moyenne en RANS peut également s'interpréter comme une opération de filtrage, permettant ainsi d'adopter des notations communes aux approches RANS et LES.

Filtrage LES

Dans l'approche LES, on applique un filtre passe-haut dans l'espace physique (ou passe-bas dans l'espace spectral) aux variables de l'écoulement (SAGAUT [235]). Les échelles dont la taille est supérieure à celle du filtre

Δ sont ainsi résolues, tandis que les structures inférieures à la taille du filtre, dites "de sous-maille", sont non résolues. Le rôle d'un modèle de sous-maille est alors de rendre compte de l'effet de ces structures non résolues sur l'écoulement résolu. Le champ filtré spatialement d'une variable ϕ est défini de la manière suivante :

$$\overline{\phi(\boldsymbol{x})} = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(\boldsymbol{r}) G_\Delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r}) d\boldsymbol{r} = G_\Delta \star \phi \,, \tag{5.57}$$

où G_Δ est le noyau de convolution du filtre, dont la longueur de coupure est notée Δ. Dans l'approche LES, $\overline{\phi}$ désigne donc la partie filtrée, ou partie résolue de la variable ϕ. La partie de sous-maille, ou partie non-résolue ϕ' est également le résultat d'une opération de convolution :

$$\phi' = (1-G) \star \phi \,. \tag{5.58}$$

Les filtres LES homogènes (échelle de coupure Δ constante) possèdent les propriétés de linéarité, commutativité par rapport aux dérivées et conservation des constantes. En revanche, les filtres inhomogènes (échelle de coupure variable) perdent certaines de ces propriétés, notamment la commutativité par rapport aux dérivées, ce qui introduit des termes d'erreur dans les équations. Or, en pratique le filtre LES est imposé par le maillage et par le schéma numérique de discrétisation spatiale. Aussi, les maillages non structurés à raffinement inhomogène conduisent à un filtre qui l'est également. Dans ce cas, il est parfois difficile de caractériser l'influence précise des modèles de sous-maille au milieu d'un ensemble d'erreurs numériques (erreur de commutativité, erreur du schéma numérique...) [2]. Par ailleurs, les filtres LES, qu'ils soient homogènes ou non, ne sont pas des opérateurs de Reynolds car ils ne sont en général pas idempotents. Et donc notamment, les relations (5.56) ne sont plus vérifiées :

$$\overline{\overline{\phi}} \neq \overline{\phi} \,, \qquad \overline{\phi'} \neq 0 \,. \tag{5.59}$$

Par conséquent, quel que soit le filtre utilisé, le filtrage LES des équations de Navier-Stokes introduit des termes supplémentaires par rapport aux équations RANS. Selon les cas, ces termes doivent être pris en compte dans les modèles de sous-mailles LES, ou bien peuvent être négligés si cela se justifie.

Équations de conservation filtrées

Pour obtenir les équations de conservation filtrées, que ce soit en RANS ou en LES, le filtre $\overline{\bullet}$ est d'abord appliqué aux équations instantanées décrites en § 5.1, puis chaque variable est décomposée suivant la moyenne de Favre. On introduit alors le vecteur $\overline{\boldsymbol{Q}}$ des quantités conservées filtrées :

$$\overline{\boldsymbol{Q}} = \begin{pmatrix} \overline{\rho}\widetilde{Y_1} & \dots & \overline{\rho}\widetilde{Y_{N_g}} & \overline{\rho}\widetilde{Y_{N_t}} & \overline{\rho}\widetilde{\boldsymbol{u}} & \overline{\rho}\widetilde{e_t} \end{pmatrix}^t \,, \qquad \overline{\rho} = \sum_{i=1}^{n_t} \overline{\rho}\widetilde{Y_i} \,. \tag{5.60}$$

De même, on peut définir le vecteur $\widetilde{\boldsymbol{U}}$ des variables naturelles filtrées au sens de Favre :

$$\widetilde{\boldsymbol{U}} = \begin{pmatrix} \widetilde{P} & \widetilde{T} & \widetilde{\boldsymbol{u}} & \widetilde{Y_1} & \dots & \widetilde{Y_{N_g}} & \widetilde{Y_{N_t}} \end{pmatrix}^t \,, \qquad \sum_{i=1}^{n_t} \widetilde{Y_i} = 1 \,. \tag{5.61}$$

Par ailleurs, on introduit $\widehat{\boldsymbol{F_C}}$ et $\widehat{\boldsymbol{F_D}}$ les vecteurs "filtrés" des flux convectifs et des flux diffusifs :

$$\widehat{\boldsymbol{F_C}} = \begin{pmatrix} \overline{\rho}\widetilde{Y_1}\widetilde{\boldsymbol{u}} \\ \dots \\ \overline{\rho}\widetilde{Y_{N_g}}\widetilde{\boldsymbol{u}} \\ \overline{\rho}\widetilde{Y_{N_t}}\widetilde{\boldsymbol{u}} \\ \overline{\rho}\widetilde{\boldsymbol{u}}\otimes\widetilde{\boldsymbol{u}} + \overline{P}\boldsymbol{I} \\ (\overline{\rho}\widetilde{e_t} + \overline{P})\widetilde{\boldsymbol{u}} \end{pmatrix} = \overline{\boldsymbol{Q}} \otimes \widetilde{\boldsymbol{u}} + \overline{P} \begin{pmatrix} 0 \\ \dots \\ 0 \\ 0 \\ \boldsymbol{I} \\ \widetilde{\boldsymbol{u}} \end{pmatrix} , \tag{5.62}$$

$$\widehat{\boldsymbol{F_D}} = \begin{pmatrix} -\overline{\boldsymbol{J}}_1 \\ \dots \\ -\overline{\boldsymbol{J}}_{N_g} \\ -\overline{\boldsymbol{J}}_{N_t} \\ \overline{\boldsymbol{\tau}} - \overline{\boldsymbol{\tau}}_c \\ (\overline{\boldsymbol{\tau}} - \overline{\boldsymbol{\tau}}_c)\cdot\widetilde{\boldsymbol{u}} - \overline{\boldsymbol{J}}_{e_t} \end{pmatrix} . \tag{5.63}$$

Nous avons également le vecteur des termes sources filtrés, noté $\widehat{\boldsymbol{S}}$, et qui se décompose comme dans la relation (5.28) en trois contributions : les termes sources filtrés de couplage avec la phase dispersée, regroupés dans un vecteur noté $\widehat{\boldsymbol{S_{FD}}}$, les termes sources liés à la gravité, regroupés dans le vecteur $\widehat{\boldsymbol{S_G}}$, et les termes sources chimiques,

2. C'est dans ce contexte que peut se justifier l'utilisation d'une approche "implicite" de la LES (ILES, MILES), considérant simplement que la dissipation introduite par les schémas numériques inclut d'une certaine façon déjà la dissipation "physique" des échelles de sous-maille.

regroupés dans un vecteur noté $\widehat{\boldsymbol{S_\omega}}$. On écrit ainsi

$$\widehat{\boldsymbol{S}} = \begin{pmatrix} 0 \\ \\ \overline{S_M^g} \\ \overline{S_M^l} \\ \overline{\boldsymbol{S_U}} \\ \overline{S_E} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \overline{\dot\omega_1} \\ \dots \\ \overline{\dot\omega_{N_g}} \\ 0 \\ \overline{\rho}\boldsymbol{g} \\ \overline{\rho}\boldsymbol{g}\cdot\widetilde{\boldsymbol{u}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \dots \\ \overline{S_M^g} \\ \overline{S_M^l} \\ \overline{\boldsymbol{S_U}} \\ \overline{S_E} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ \dots \\ 0 \\ 0 \\ \overline{\rho}\boldsymbol{g} \\ \overline{\rho}\boldsymbol{g}\cdot\widetilde{\boldsymbol{u}} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \overline{\dot\omega_1} \\ \dots \\ \overline{\dot\omega_{N_g}} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \widehat{\boldsymbol{S_{FD}}} + \widehat{\boldsymbol{S_G}} + \widehat{\boldsymbol{S_\omega}}\,. \tag{5.64}$$

Il faut bien noter que ces vecteurs "filtrés" sont définis à dessein de manière à ne faire intervenir que des variables filtrées (*résolues* en LES), sans termes croisés. Or, des termes croisés apparaissent inévitablement lorsque les équations sont filtrées. Ces termes croisés, non fermés, sont regroupés sous la forme d'un vecteur des flux turbulents, noté $\boldsymbol{F_T}$ et défini par

$$\boldsymbol{F_T} = \begin{pmatrix} -\overline{\rho}\left(\widetilde{Y_1\boldsymbol{u}} - \widetilde{Y}_1\widetilde{\boldsymbol{u}}\right) \\ \dots \\ -\overline{\rho}\left(\widetilde{Y_{N_g}\boldsymbol{u}} - \widetilde{Y_{N_g}}\widetilde{\boldsymbol{u}}\right) \\ -\overline{\rho}\left(\widetilde{Y_{N_t}\boldsymbol{u}} - \widetilde{Y_{N_t}}\widetilde{\boldsymbol{u}}\right) \\ -\overline{\rho}\left(\widetilde{\boldsymbol{u}\otimes\boldsymbol{u}} - \widetilde{\boldsymbol{u}}\otimes\widetilde{\boldsymbol{u}}\right) \\ \left(\overline{(\boldsymbol{\tau}-\boldsymbol{\tau}_c)\cdot\boldsymbol{u}} - (\overline{\boldsymbol{\tau}}-\overline{\boldsymbol{\tau}}_c)\cdot\widetilde{\boldsymbol{u}}\right) + \left(\overline{\rho e_t} + \overline{P})\widetilde{\boldsymbol{u}} - \overline{(\rho e_t + P)\boldsymbol{u}}\right) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\boldsymbol{J}_1^t \\ \dots \\ -\boldsymbol{J}_{N_g}^t \\ -\boldsymbol{J}_{N_t}^t \\ -\boldsymbol{\tau}^t \\ -\boldsymbol{J}_{e_t}^t \end{pmatrix}. \tag{5.65}$$

Les notations $\boldsymbol{J}_i^t$, $\boldsymbol{\tau}^t$ et $\boldsymbol{J}_{e_t}^t$ ont été introduites pour désigner respectivement les flux de diffusion turbulente des espèces, le tenseur des contraintes turbulentes, et le flux de diffusion turbulente de l'énergie totale. Cette manière de procéder permet d'isoler la contribution des flux de diffusion "laminaires" sous la forme du vecteur $\widehat{\boldsymbol{F_D}}$, et celle des flux de diffusion "turbulents" au sein du vecteur $\boldsymbol{F_T}$. Ainsi, on notera que l'on retrouve le système des équations de Navier-Stokes instantanées si les flux turbulents sont négligés. En termes d'architecture de code, ceci permet de réaliser des simulations RANS, LES, ou DNS avec le même solveur, en modifiant simplement le choix des modèles à appliquer pour exprimer le vecteur des flux turbulents.

Les flux de diffusion laminaires sont évalués à partir des variables filtrées selon les différentes expression déjà introduites au paragraphe § 5.2, et moyennant certaines approximations :

$$\overline{\boldsymbol{J}}_i = -\overline{\rho\mathcal{D}_i\nabla Y_i} = -\overline{\rho}\widehat{\mathcal{D}_i\nabla Y_i} \approx -\overline{\rho}\mathcal{D}_i(\widetilde{T})\nabla\widetilde{Y}_i\,, \qquad 1 \le i \le N_t\,, \tag{5.66}$$

$$\overline{\boldsymbol{J}}_{e_t} = \overline{\boldsymbol{q}} + \sum_{i=1}^{N_t}\overline{h_i\boldsymbol{J}_i} = \overline{\boldsymbol{q}} + \sum_{i=1}^{N_t}\overline{\rho}\,(\widehat{\mathcal{D}_i h_i\nabla Y_i}) \approx -\lambda(\widetilde{T})\nabla\widetilde{T} - \overline{\rho}\sum_{i=1}^{N_t}\mathcal{D}_i(\widetilde{T})\widetilde{h}_i\nabla\widetilde{Y}_i\,. \tag{5.67}$$

De même, moyennant certaines approximations liées à leur non-linéarité, les tenseurs filtrés des contraintes visqueuses et des contraintes capillaires s'expriment en fonction de variables filtrées uniquement. Selon les expressions déjà introduites en (5.43) et (5.19), nous avons ainsi :

$$\overline{\boldsymbol{\tau}} = 2\,\mu(\widetilde{T})\left[\widetilde{\boldsymbol{S}} - \frac{1}{3}(\nabla\cdot\widetilde{\boldsymbol{u}})\boldsymbol{I}\right] = 2\,\mu(\widetilde{T})\widetilde{\boldsymbol{D}}\,, \qquad \overline{\boldsymbol{\tau}_c} = \sigma(\widetilde{T})\|\nabla\widetilde{\alpha}\|\left(\boldsymbol{I} - \frac{\nabla\widetilde{\alpha}}{\|\nabla\widetilde{\alpha}\|}\otimes\frac{\nabla\widetilde{\alpha}}{\|\nabla\widetilde{\alpha}\|}\right). \tag{5.68}$$

Par ailleurs, en toute rigueur, les termes sources de couplage avec la phase dispersée devraient prendre en compte l'effet de la turbulence. Cette interaction est cependant complexe à modéliser, et à ce titre elle a fait l'objet de nombreuses études spécifiques [3]. Le sujet de l'interaction entre la phase dispersée et la turbulence de la phase porteuse ne sera pas traité dans cette étude, où ***nous supposerons que l'expression des termes sources de couplage,*** $\overline{S_M^g}$, $\overline{S_M^l}$, $\overline{\boldsymbol{S_U}}$ ***et*** $\overline{S_E}$, ***repose uniquement sur des quantités résolues***. Il est attendu que les conséquences de cette hypothèse soient d'autant moins pénalisantes que le spectre des échelles turbulentes de la phase gazeuse est bien résolu. Autrement dit, si la non-prise en compte de cette interaction dans le cadre d'un formalisme RANS est très discutable, c'est moins problématique dans un cadre LES.

De manière similaire, l'expression des termes sources filtrés de production et destruction d'espèces par réactions chimiques $\overline{\dot\omega_i}$ est loin d'être triviale. En effet, du fait de la forte non-linéarité des termes sources chimiques en général [4], ceux-ci ne peuvent pas s'exprimer simplement en fonction des variables filtrées. Leur évaluation passe par des modèles de combustion turbulente. Il en existe un certain nombre, et le choix d'un modèle spécifique est

3. Voir la discussion à propos de la fermeture des termes turbulents au paragraphe § 3.3.1.4, et les références associées.
4. Une réaction chimique dont la cinétique est décrite par la loi d'Arrhenius a une dépendance exponentielle en l'inverse de la température.

largement fonction de l'application étudiée et du niveau de précision recherché. Le modèle utilisé dans cette étude est décrit en § 7.3. Finalement, le système des équations de conservation filtrées s'écrit

$$\boxed{\frac{\partial \overline{\boldsymbol{Q}}}{\partial t} + \nabla . \widehat{\boldsymbol{F_C}} = \nabla . (\widehat{\boldsymbol{F_D}} + \boldsymbol{F_T}) + \widehat{\boldsymbol{S}} .} \tag{5.69}$$

En comparaison du système (5.29) des équations de conservation instantanées, il apparait des termes supplémentaires non fermés liés à la turbulence (termes de sous-maille en LES). La section suivante détaille certains des modèles de fermeture classiques à notre disposition.

5.4.4 Fermeture des termes turbulents

Il s'agit ici de proposer une modélisation pour les termes non fermés qui apparaissent dans le vecteur des flux turbulents $\boldsymbol{F_T}$, introduit dans la section précédente.

Expression du tenseur des contraintes turbulentes : l'approximation de Boussinesq

Le tenseur des contraintes turbulentes $\boldsymbol{\tau}^t = \overline{\rho}\left(\widetilde{\boldsymbol{u}\otimes\boldsymbol{u}} - \widetilde{\boldsymbol{u}}\otimes\widetilde{\boldsymbol{u}}\right)$ intervient dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement. En RANS, du fait de l'idempotence de l'opérateur de filtrage, ce tenseur se réduit au tenseur de Reynolds :

$$\boldsymbol{\tau}^t = -\overline{\rho}\widetilde{\boldsymbol{u}''\boldsymbol{u}''} . \tag{5.70}$$

En revanche, comme nous l'avons vu au paragraphe § "Filtrage LES", l'opérateur de filtrage perd ses propriétés d'idempotence en LES. En conséquence, le tenseur des contraintes turbulentes comprend des termes supplémentaires par rapport au cas RANS. Il se décompose de la manière suivante :

$$\boldsymbol{\tau}^t = \underbrace{-\overline{\rho}\left(\widetilde{\widetilde{\boldsymbol{u}}\widetilde{\boldsymbol{u}}} - \widetilde{\boldsymbol{u}}\widetilde{\boldsymbol{u}}\right)}_{\boldsymbol{L}} \underbrace{- \overline{\rho}\left(\widetilde{\widetilde{\boldsymbol{u}}\boldsymbol{u}''} + \widetilde{\boldsymbol{u}''\widetilde{\boldsymbol{u}}}\right)}_{\boldsymbol{C}} \underbrace{- \overline{\rho}\widetilde{\boldsymbol{u}''\boldsymbol{u}''}}_{\boldsymbol{R}} . \tag{5.71}$$

Le tenseur de Léonard $\boldsymbol{L}$ caractérise les interactions entre les échelles résolues, le tenseur croisé $\boldsymbol{C}$ correspond aux interactions entre les échelles résolues et les échelles de sous-maille, tandis que le tenseur de Reynolds $\boldsymbol{R}$ représente les interactions entre les échelles de sous-maille. Le tenseur de Reynolds et le tenseur croisé nécessitent une modélisation, mais pas le tenseur de Léonard puisqu'il ne fait intervenir que des grandeurs résolues. En toute rigueur, la modélisation du tenseur des contraintes turbulentes devrait prendre en compte cette décomposition triple. Néanmoins, en RANS comme en LES, une approche différente est généralement retenue, selon laquelle seul le tenseur de Reynolds est pris en compte. Celui-ci est alors modélisé d'après l'approximation de Boussinesq :

$$\boldsymbol{\tau}^t \approx \boldsymbol{R} \approx 2\mu_t\left[\widetilde{\boldsymbol{S}} - \frac{1}{3}(\nabla\cdot\widetilde{\boldsymbol{u}})\boldsymbol{I}\right] - \frac{2}{3}\overline{\rho}k\boldsymbol{I} = 2\mu_t\widetilde{\boldsymbol{D}} - \frac{2}{3}\overline{\rho}k\boldsymbol{I} , \tag{5.72}$$

où $k = \boldsymbol{u}''\cdot\boldsymbol{u}''/2$ désigne l'énergie cinétique turbulente. Par analogie avec le tenseur des contraintes visqueuses laminaires (cf. § 5.2.3), le tenseur des contraintes turbulentes est supposé proportionnel au tenseur des taux de déformation filtré $\widetilde{\boldsymbol{S}}$. La constante de proportionnalité μ_t est appelée ***viscosité turbulente***. L'effort de modélisation est ainsi reporté sur la viscosité turbulente μ_t et l'énergie cinétique turbulente k. Pour cela, les modèles sont différents suivant que l'on opte pour une approche RANS ou LES. Notamment, le dernier terme de l'équation (5.72) est très souvent négligé en LES. On évite ainsi d'avoir à modéliser l'énergie cinétique k des échelles turbulentes de sous-maille.

Fermetures RANS du tenseur des contraintes turbulentes

La littérature est très fournie en modèles de fermeture dans le cadre RANS. Parmi les plus classiques, on peut citer le modèle à 2 équations $k-\epsilon$ (JONES et LAUNDER [153]), dans lequel la viscosité turbulente est donnée par :

$$\mu_t = \frac{C_\mu\, k^2}{\epsilon} , \qquad C_\mu = 0.09 , \tag{5.73}$$

où ϵ désigne la dissipation de l'énergie cinétique turbulente. Les quantités k et ϵ sont modélisées par des équations de transport, dont on pourra trouver les expressions dans la référence JONES et LAUNDER [153]. Les modèles RANS ne sont pas davantage détaillés ici, dans la mesure où ils ne seront pas utilisés dans notre étude.

Fermetures LES du tenseur des contraintes turbulentes

Dans le cadre de la LES, le modèle le plus classique est celui de SMAGORINSKY [255], selon lequel la viscosité turbulente s'exprime :

$$\mu_t = \overline{\rho} l^2 \sqrt{2\widetilde{\boldsymbol{S}} : \widetilde{\boldsymbol{S}}}\,, \qquad l = \min(C_S \Delta, \kappa \|\boldsymbol{d}_p\|)\,, \tag{5.74}$$

où Δ désigne la taille du filtre, $\kappa \approx 0.41$ est la constante de Karman, $C_S \approx 0.18$ est la constante de Smagorinsky, et $\boldsymbol{d}_p$ est le vecteur "distance à la paroi". Le modèle de Smagorinsky est ici écrit dans sa version "amortie", de manière à ce que la viscosité de sous-maille s'annule à proximité des parois. La taille du filtre Δ est assimilée au diamètre équivalent des mailles :

$$\Delta \approx D_h = \frac{6V}{\mathcal{A}}\,, \tag{5.75}$$

où V et $\mathcal{A}$ désignent le volume de la maille et l'aire totale de ses faces. Le terme $\widetilde{\boldsymbol{S}} : \widetilde{\boldsymbol{S}}$ désigne le produit doublement contracté de $\widetilde{\boldsymbol{S}}$ par lui-même, $\widetilde{\boldsymbol{S}}$ étant la partie symétrique du tenseur des taux de déformation (filtré). En pratique, dans CEDRE, le tenseur $\widetilde{\boldsymbol{S}}$ est remplacé par son déviateur $\widetilde{\boldsymbol{D}}$ afin de prendre en compte les effets de compressibilité. L'expression des tenseurs $\widetilde{\boldsymbol{S}}$ et $\widetilde{\boldsymbol{D}}$ est donnée en Annexe C, de même que l'expression du produit doublement contracté. Pour simplifier l'écriture, introduisons le second invariant du tenseur $\widetilde{\boldsymbol{D}}$, noté II_D, et qui est égal au produit doublement contracté (cf. Annexe C) :

$$II_D = \widetilde{\boldsymbol{D}} : \widetilde{\boldsymbol{D}}\,. \tag{5.76}$$

Dans le cadre du modèle de Smagorinsky, l'énergie cinétique turbulente de sous-maille, notée k_{SGS}, est alors approchée par :

$$k_{SGS} \approx (2/0,3)\, C_s^2\, \Delta^2 II_D\,. \tag{5.77}$$

Et une approximation de son taux de dissipation est également donnée par :

$$\epsilon_{SGS} \approx \frac{k_{SGS}^{3/2}}{\Delta}\,. \tag{5.78}$$

Des modèles plus évolués que le modèle de Smagorinsky ont été développés pour la LES : modèles dynamiques, échelles mixtes, similarité d'échelles... Des revues détaillées de ces modèles sont disponibles dans SAGAUT [235], GARNIER [103] ou MENEVEAU et KATZ [193].

Qualité de la résolution d'une LES

La simulation aux grandes échelles repose sur le principe d'une échelle de coupure filtrant les plus petites échelles turbulentes de l'écoulement, celles-ci devant être modélisées. Cette approche impose que l'échelle de coupure, directement reliée à la taille des cellules du maillage, soit située dans la partie inertielle du spectre turbulent (cf. Figure 5.1). Par ailleurs, plus l'échelle de coupure est basse (c'est-à-dire plus le maillage est fin), plus la résolution de la LES est élevée. Et donc moins l'effet du modèle de sous-maille se fait ressentir [5].

En pratique, il est possible d'évaluer la qualité d'une LES en termes de résolution du maillage. Différentes techniques ont été développées dans ce but. Elles passent par exemple par l'évaluation du rapport μ_t/μ (viscosité turbulente sur viscosité moléculaire), ou encore par l'utilisation de fonctions de corrélation à deux points. Voir à ce sujet les travaux de BAZDIDI-TEHRANI et al. [17], DAVIDSON [53], BOUDIER et al. [27] et CELIK et al. [36] (dont on trouve une application dans MOULE et al. [197]), ainsi que l'ouvrage plus général de SAGAUT [235].

Flux de diffusion turbulents

Les flux de diffusion turbulents d'espèces et d'énergie, respectivement notés $\boldsymbol{J}_i^t$ et $\boldsymbol{J}_{e_t}^t$, sont modélisés ici selon une hypothèse de gradient par analogie avec les flux de diffusion laminaires [6]. Ces fermetures peuvent en outre s'appliquer en RANS comme en LES. On a ainsi pour les flux de diffusion turbulente des espèces :

$$\boldsymbol{J}_i^t = -\overline{\rho}\mathcal{D}_i^t \nabla \widetilde{Y}_i\,, \qquad 1 \le i \le N_t\,. \tag{5.79}$$

De même pour le flux d'énergie turbulente :

$$\boldsymbol{J}_{e_t}^t = \boldsymbol{q}^t + \sum_{i=1}^{N_t} \overline{h}_i \boldsymbol{J}_i^t + \boldsymbol{\tau}^t \widetilde{\boldsymbol{u}}\,, \qquad \boldsymbol{q}^t = -\lambda^t \nabla \widetilde{T}\,. \tag{5.80}$$

5. En théorie, les résultats d'une LES très bien résolue devraient converger vers ceux d'une DNS. Autrement dit, l'effet du modèle de sous-maille devrait s'annuler à mesure que la taille des cellules du maillage tend vers zéro.

6. C'est l'approche la plus simple, mais il est également possible de résoudre des équations de transport pour les corrélations croisées entre fluctuations.

Les coefficients de diffusion et de conductivité thermique turbulents, $\mathcal{D}_i^t$ et λ^t, sont évalués comme

$$\mathcal{D}_i^t = \mathcal{D}^t = \frac{\mu_t}{\overline{\rho}\mathrm{Sc}^t}\,, \qquad \lambda^t = \frac{\mu_t}{\mathrm{Pr}^t}\sum_{i=1}^{N_t}\widetilde{Y}_i\, c_{p,i}(\widetilde{T})\,. \tag{5.81}$$

Le nombre de Schmidt turbulent Sc^t et le nombre de Prandtl turbulent Pr^t sont des constantes, prises égales à 0.9 pour toutes les espèces.

5.4.5 L'approche implicite de la turbulence

Nous venons de voir dans les paragraphes précédents différents formalismes utilisés pour modéliser la turbulence, notamment celui de la LES et les modèles de fermeture associés : concept de viscosité turbulente et modèle de Smagorinsky. Le rôle de ces modèles de fermeture est de modéliser de manière ***explicite*** la dissipation de l'énergie turbulente par les échelles qui ne sont pas captées par le maillage (échelles de sous-maille), en se basant sur des considérations physiques. Cette dissipation explicite est intégrée aux équations via les termes de diffusion turbulente.

Par opposition à cette approche explicite, il est possible d'adopter une approche ***implicite*** de la turbulence, ou plus précisément de la LES. On utilise ainsi l'acronyme général ILES pour Implicit Large Eddy Simulation (voir l'ouvrage de référence de GRINSTEIN et al. [116]). Comme pour la LES explicite, il s'agit d'utiliser un maillage suffisamment fin pour capturer les grandes échelles énergétiques ainsi qu'une partie des échelles inertielles de la turbulence. En revanche, la dissipation physique (réelle) de l'énergie turbulente par les échelles de sous-mailles n'est plus modélisée de manière explicite. On considère qu'elle est d'une certaine manière déjà contenue dans la dissipation numérique (artificielle) générée par les schémas de discrétisation spatiale des équations de Navier-Stokes. Les équations résolues ne contiennent alors pas de termes explicitement reliés à la turbulence. Il s'agit simplement de résoudre les équations de Navier-Stokes non filtrées.

Cette approche a été justifiée par certains auteurs en écrivant les équations de Navier-Stokes sous forme discrète, puis en comparant l'erreur de troncature des schémas numériques à la dissipation attendue de l'énergie turbulente en sous-maille sur des cas académiques (FUREBY et GRINSTEIN [101], ASPDEN et al. [10], MARGOLIN et al. [185]). Un résumé des travaux sur le sujet est également disponible dans GARNIER [103]. Ce type de formalisme est évidemment discutable, et il est clair que dans l'idéal la meilleure stratégie possible doit reposer sur :

(i) des schémas numériques très précis réduisant au minimum la dissipation numérique "artificielle".

(ii) des modèles décrivant explicitement et de manière fiable (basée sur des considérations physiques pertinentes) la dissipation par les échelles de sous-maille.

Malheureusement, lorsque l'on traite des écoulements diphasiques, compressibles, turbulents et réactifs, présentant de forts gradients et des termes sources raides, il est très difficile d'avoir :

(i) des schémas numériques très précis et en même temps parfaitement robustes. Nous verrons aux Chapitre 8 et Chapitre 9 que disposer de schémas numériques robustes et précis à l'ordre 2 seulement est déjà un objectif en soi, particulièrement sur des maillages non structurés généraux.

(ii) des modèles de sous-maille pour la LES parfaitement adaptés et fiables. La grande majorité des travaux dédiés à la turbulence sont consacrés aux écoulements monophasiques et souvent incompressibles. La question se pose alors, par exemple, de la validité du modèle de Smagorinsky dans le cas de notre fluide diphasique où la densité est fortement variable.

Le second point n'est pas, en soi, le plus limitant. Des modèles plus évolués que le modèle de Smagorinsky existent et pourraient être utilisés ou étendus aux cas d'écoulements diphasiques réactifs [7]. Néanmoins, l'étude des modèles de sous-maille pour la LES ne constitue pas l'objectif immédiat de nos travaux. C'est pourquoi, plutôt que de choisir un modèle classique, disponible mais pas forcément bien adapté, nous opterons finalement pour une approche implicite de la LES lors de la simulation numérique du banc Mascotte (cf. Chapitre 11). Il faudra cependant garder à l'esprit que la modélisation de la turbulence constitue une piste d'amélioration importante de notre stratégie actuelle.

Notons enfin qu'une approche implicite de la turbulence n'empêche pas d'estimer l'énergie cinétique turbulente de sous-maille k_{SGS} et sa dissipation ϵ_{SGS}, qui sont des grandeurs potentiellement utiles à certains modèles que nous utiliserons ou développerons par la suite. En effet, rien n'empêche d'utiliser les relations (5.77) et (5.78) du modèle de Smagorinsky puisque ces relations n'incluent que des grandeurs résolues.

7. Voir à ce sujet les travaux de CHESNEL et al. [41] évoqués en § 3.2.3.

5.5 Fermeture thermodynamique du système fluide

On appelle “fermeture thermodynamique” l’ensemble des relations issues de la thermodynamique qui permettent de procéder au changement de variable $\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{U}) \leftrightarrow \boldsymbol{U}(\boldsymbol{Q})$, et qui en ce sens sont nécessaires à la résolution du système des équations de conservation du fluide. Cette section vise à présenter en détail ces relations. Il s’agit en effet d’un aspect particulièrement sensible de notre stratégie "à 4 équations", l’équilibre immédiat de la pression et de la température des phases étant imposé à chaque instant. Pour ne pas alourdir les notations, nous travaillerons ici avec les variables non filtrées (cf. § 5.1).

5.5.1 Rappels de thermodynamique

Définition des potentiels thermodynamiques et des variables d’état

Un potentiel thermodynamique est une fonction qui atteint un minimum à l’équilibre thermodynamique, et à partir de laquelle il est possible de déterminer l’ensemble des propriétés du système. Il existe différents potentiels thermodynamiques correspondant à différents jeux de variables d’état. Les quatre potentiels les plus couramment utilisés sont définis dans le Tableau 5.1 ci-dessous.

Nom du potentiel	Définition	Variables d’état	Relation différentielle
Énergie interne	E	$\{S, V\}$	$\mathrm{d}E = +T\mathrm{d}S - P\mathrm{d}V$
Énergie libre de Helmholtz	$F = E - TS$	$\{T, V\}$	$\mathrm{d}F = -S\,\mathrm{d}T - P\mathrm{d}V$
Enthalpie	$H = E + PV$	$\{S, P\}$	$\mathrm{d}H = +T\mathrm{d}S + V\mathrm{d}P$
Enthalpie libre de Gibbs	$G = H - TS$	$\{T, P\}$	$\mathrm{d}G = -S\,\mathrm{d}T + V\mathrm{d}P$

TABLEAU 5.1 – ***Définitions des potentiels thermodynamiques et relations différentielles.***

Des relations différentielles relient ces potentiels aux variables d’état que sont la température T, la pression P, le volume V et l’entropie S. Les variables P et T sont dites intensives [8], tandis que les variables V et S sont extensives [9]. Par ailleurs, $(P, -V)$ et (T, S) constituent des paires de variables conjuguées [10]. Dans un souci de simplicité, les relations différentielles établies ici supposent la quantité de matière du système constante. Ceci permet d’ignorer la paire de variables conjuguées (μ, N), μ désignant le potentiel chimique (variable intensive) et N la quantité de matière (variable extensive).

La relation différentielle sur l’énergie interne E est une conséquence des deux premiers principes de la thermodynamique. En effet, le premier principe stipule que les variations de l’énergie interne E d’un système fermé sont dues (en l’absence de réaction chimique) à la quantité de chaleur δQ qu’il échange, et au travail δW qu’il fournit, soit :

$$\mathrm{d}E = \delta Q + \delta W \,. \tag{5.82}$$

Dans le cas d’une transformation réversible et en considérant le seul travail des forces de pression, le second principe de la thermodynamique permet d’écrire :

$$\delta Q = T\mathrm{d}S \,, \qquad \delta W = -P\mathrm{d}V \,, \tag{5.83}$$

et il vient donc la forme différentielle suivante pour l’énergie interne :

$$\mathrm{d}E = T\mathrm{d}S - P\mathrm{d}V \,. \tag{5.84}$$

Les relations différentielles pour H, F et G s’obtiennent ensuite en appliquant la transformation de Legendre à la relation différentielle pour E.

Relations de Maxwell

Les relations de Maxwell désignent l’ensemble des équations aux dérivées partielles que l’on peut obtenir en appliquant le théorème de Schwarz aux formes différentielles des potentiels thermodynamiques. De manière immédiate (cf. Tableau 5.1), les relations de Maxwell permettent ainsi de définir thermodynamiquement la pression,

8. Une variable d’état est intensive si elle est indépendante de la quantité de matière du système.
9. Une variable d’état est extensive si elle est proportionnelle à la quantité de matière du système.
10. On appelle variables conjuguées un couple de variables dont l’une est extensive et l’autre intensive, et dont le produit est homogène à une énergie.

la température, l'entropie et le volume :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_S &= \left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T = -P\,, \qquad \left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_V = \left(\frac{\partial H}{\partial S}\right)_P = T\,, \\ \left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V &= \left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_P = -S\,, \qquad \left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)_S = \left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_T = V\,. \end{aligned} \tag{5.85}$$

Il est également possible d'écrire des relations uniquement entre les dérivées partielles des variables d'état. De manière générale, si $(X, \overline{X})$ et $(Y, \overline{Y})$ désignent deux paires de variables d'état conjuguées, $X, Y \in \{P, T, V, S\}$, nous avons la relation suivante :

$$\left(\frac{\partial X}{\partial Y}\right)_{\overline{X}} = -\delta_X \delta_Y \cdot \left(\frac{\partial \overline{Y}}{\partial \overline{X}}\right)_Y \quad ; \quad \delta_i = \begin{cases} 1 & \text{si } i \text{ est une grandeur extensive} \\ -1 & \text{si } i \text{ est une grandeur intensive} \end{cases} \tag{5.86}$$

Plus précisément, les relations suivantes sont vérifiées :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V = \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T\,, \quad \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P = -\left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_T\,, \quad \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S = -\left(\frac{\partial P}{\partial S}\right)_V\,, \quad \left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_S = \left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_P\,. \tag{5.87}$$

Un moyen mnémotechnique très efficace permet de retrouver l'ensemble des relations introduites dans cette section (transformées de Legendre qui définissent les potentiels, relations différentielles et relations de Maxwell). La méthode consiste à placer les quatre potentiels et les quatre variables dans un carré, nommé ***carré thermodynamique de Born***. Il existe différentes versions de la méthode, la plus efficace étant probablement celle expliquée dans la référence ZHAO [307].

Coefficients calorimétriques

Considérons un système thermodynamique quelconque qui subit une transformation réversible. Comme nous l'avons vu précédemment, d'après le second principe de la thermodynamique, la quantité de chaleur reçue par le système peut s'exprimer comme

$$\delta Q = \mathrm{d}E - \delta W = \mathrm{d}E + P\mathrm{d}V = \mathrm{d}H - V\mathrm{d}P\,. \tag{5.88}$$

Écrivons les formes différentielles totales exactes suivantes pour l'énergie interne et l'enthalpie :

$$\mathrm{d}E = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V \mathrm{d}T + \left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_T \mathrm{d}V\,, \qquad \mathrm{d}H = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_P \mathrm{d}T + \left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)_T \mathrm{d}P\,. \tag{5.89}$$

Il vient donc :

$$\delta Q = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V \mathrm{d}T + \left[P + \left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_T\right] \mathrm{d}V\,, \tag{5.90}$$

et

$$\delta Q = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_P \mathrm{d}T + \left[\left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)_T - V\right] \mathrm{d}P\,. \tag{5.91}$$

Par ailleurs, seules deux variables d'état évoluent de façon indépendante au cours de la transformation (le système est divariant). La quantité de chaleur reçue par le système peut ainsi s'exprimer sous plusieurs formes équivalentes, selon le système de variables choisi : (T, V), (P, T) ou (P, V). On a ainsi :

$$\begin{aligned} \delta Q &= \gamma_{T,V}\mathrm{d}T + \gamma_{V,T}\mathrm{d}V\,, \\ \delta Q &= \gamma_{T,P}\mathrm{d}T + \gamma_{P,T}\mathrm{d}P\,, \\ \delta Q &= \gamma_{P,V}\mathrm{d}P + \gamma_{V,P}\mathrm{d}V\,, \end{aligned} \tag{5.92}$$

où les coefficients $\gamma_{X,Y}$ sont nommés ***coefficients calorimétriques***. Il est possible d'expliciter certains de ces coefficients calorimétriques par identification avec les équations (5.90) et (5.91). On introduit notamment les capacités calorifiques C_v et C_p, respectivement à volume constant et à pression constante, qui sont définies par :

$$C_v = \gamma_{T,V} = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V\,, \qquad C_p = \gamma_{T,P} = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_P\,. \tag{5.93}$$

On introduit également les coefficients calorimétriques de dilatation isotherme L_v (ou chaleur latente de dilatation), et de compression isotherme L_p (ou chaleur latente de compression) :

$$L_v = \gamma_{V,T} = P + \left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_T\,, \qquad L_p = \gamma_{P,T} = \left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)_T - V\,. \tag{5.94}$$

Coefficients thermoélastiques

Étant donné un système thermodynamique décrit par ses variables d'état (P, T, V), il est possible et utile de définir des grandeurs adimensionnelles et intensives, nommées ***coefficients thermoélastiques***, qui caractérisent la manière dont les variables d'état varient les unes en fonction des autres. Par exemple, le coefficient de dilatation isobare α, défini par

$$\alpha = \frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P , \tag{5.95}$$

décrit dans quelle mesure le volume du système varie sous l'effet d'une variation de température, à pression constante. Les coefficients de compressibilité isotherme et isentropique, respectivement notés β_T et β_S, sont eux définis par

$$\beta_T = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T , \qquad \beta_S = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_S . \tag{5.96}$$

Ils caractérisent les variations du volume du système lorsque la pression varie, et que la température et l'entropie sont respectivement maintenues constantes.

Grandeurs massiques

A ce stade, il est utile d'introduire pour la suite des grandeurs massiques. Toute grandeur extensive X peut s'exprimer sous sa forme massique intensive $x = X/m$, où m est l'unité de masse. Dans la suite, les grandeurs massiques suivantes seront ainsi utilisées : e, h, s, v, c_p, c_v. On utilisera également la masse volumique $\rho = 1/v$, inverse du volume massique. On peut alors réécrire les coefficients calorimétriques introduits précédemment, en utilisant cette fois des grandeurs massiques :

$$c_v = \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_v = \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_\rho , \qquad c_p = \left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_P , \qquad l_v = P + \left(\frac{\partial e}{\partial v}\right)_T , \qquad l_p = \left(\frac{\partial h}{\partial P}\right)_T - v . \tag{5.97}$$

De même, les coefficients thermoélastiques peuvent être reformulés :

$$\alpha = -\frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P , \qquad \beta_T = \frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_T , \qquad \beta_S = \frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_S . \tag{5.98}$$

Définition thermodynamique de la vitesse du son

La vitesse du son dans le fluide est une caractéristique essentielle du système des équations de Navier-Stokes compressibles. D'un point de vue physique, elle caractérise la vitesse à laquelle se propagent les ondes de compression-dilatation des molécules du fluide. Lorsque la variation de pression causée par l'onde sonore est relativement faible devant la pression ambiante, la compression et la détente du fluide peuvent être considérées comme des phénomènes isentropiques, et la vitesse du son est alors définie par la dérivée partielle de la pression par rapport à la masse volumique à entropie constante :

$$c^2 = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_S = \frac{1}{\rho \beta_S} , \tag{5.99}$$

où β_S est le coefficient de compressibilité isentropique défini par la relation (5.98).

Relations entre les coefficients calorimétriques et thermoélastiques

En appliquant la seconde loi de la thermodynamique, on peut démontrer les relations suivantes entre les chaleurs spécifiques (GASKELL [104]) :

$$c_p - c_v = \frac{T}{\rho}\frac{\alpha^2}{\beta_T} , \qquad \gamma = \frac{c_p}{c_v} = \frac{\beta_T}{\beta_S} . \tag{5.100}$$

Le rapport des chaleurs spécifiques γ est parfois nommé ***coefficient adiabatique***, et la première relation est la ***relation de Mayer***. On peut également démontrer les ***relations de Clapeyron*** :

$$l_v = T\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_v = \frac{c_p - c_v}{\alpha v} , \qquad l_p = l_v\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_v = -T\left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_P = -l_v \beta_T v = -\alpha v T . \tag{5.101}$$

Relations mathématiques diverses

Des considérations mathématiques permettent également d'établir les relations (5.102), où x, y, z et t peuvent désigner n'importe quel potentiel thermodynamique ou n'importe quelle variable d'état, sous forme massique ou non.

$$\begin{aligned} &\left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z \cdot \left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_z = 1 \quad ; \quad \left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z \cdot \left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)_x \cdot \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y = -1 \\ &\left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z = \left(\frac{\partial x}{\partial t}\right)_z \cdot \left(\frac{\partial t}{\partial y}\right)_z \quad ; \quad \left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z = \left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_t + \left(\frac{\partial x}{\partial t}\right)_y \cdot \left(\frac{\partial t}{\partial y}\right)_z \end{aligned} \tag{5.102}$$

Nous introduisons enfin un dernier jeu de relations utiles, regroupées sous la dénomination de ***méthode des Jacobiens*** (BONNEFOY, chapitre 8 [24]). De manière générale, on définit le jacobien W par

$$W(x,y,\alpha,\beta) = \left(\frac{\partial x}{\partial \alpha}\right)_\beta \cdot \left(\frac{\partial y}{\partial \beta}\right)_\alpha - \left(\frac{\partial x}{\partial \beta}\right)_\alpha \cdot \left(\frac{\partial y}{\partial \alpha}\right)_\beta , \tag{5.103}$$

où $(x,y,\alpha,\beta) \in A$, A étant l'ensemble des variables d'état et des potentiels thermodynamiques. Pour tout triplet $(x,y,z) \in A$ et tout couple $(\alpha,\beta) \in A$, il est alors possible de démontrer la relation suivante :

$$\left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z = \frac{W(x,z,\alpha,\beta)}{W(y,z,\alpha,\beta)} . \tag{5.104}$$

5.5.2 Changement de variables

Revenons au système des équations de conservation du fluide. Supposons les quantités conservées $\boldsymbol{Q}^n$ connues à un instant t^n. Un schéma numérique d'avancement en temps du système (cf. § 8.4) permet ensuite de calculer $\boldsymbol{Q}^{n+1}$, les quantités conservées à l'instant suivant t^{n+1}. En d'autres termes, $(\rho Y_i)^{n+1}$, $(\rho \boldsymbol{u})^{n+1}$ et $(\rho e_t)^{n+1}$ sont alors connus, soit également ρ^{n+1}, Y_i^{n+1}, $\boldsymbol{u}^{n+1}$, e_t^{n+1} et e^{n+1} par les simples changements de variables :

$$\begin{aligned} \rho^{n+1} &= \sum_{i=1}^{N_t} (\rho Y_i)^{n+1} , & Y_i^{n+1} &= \frac{(\rho Y_i)^{n+1}}{\rho^{n+1}} , \quad 1 \leq i \leq N_t , \\ \boldsymbol{u}^{n+1} &= \frac{(\rho \boldsymbol{u})^{n+1}}{\rho^{n+1}} , & e_t^{n+1} &= \frac{(\rho e_t)^{n+1}}{\rho^{n+1}} , \quad e^{n+1} = e_t^{n+1} - \frac{1}{2}\boldsymbol{u}^{n+1} \cdot \boldsymbol{u}^{n+1} . \end{aligned} \tag{5.105}$$

Afin de déterminer complètement le vecteur des variables primitives $\boldsymbol{U}^{n+1}$, défini en (5.25), il reste à obtenir les variables d'état P^{n+1} et T^{n+1} à partir de la masse volumique et de l'énergie. En pratique, le changement de variable $\boldsymbol{U}(\boldsymbol{Q})$ dans la bibliothèque thermodynamique de CEDRE fait appel à un procédé itératif de Newton (DUTOYA et MATUSZEWSKI [82]), résolvant de manière approchée les formes différentielles suivantes :

$$\mathrm{d}P = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_e \mathrm{d}\rho + \left(\frac{\partial P}{\partial e}\right)_\rho \mathrm{d}e , \qquad \mathrm{d}T = \left(\frac{\partial T}{\partial \rho}\right)_e \mathrm{d}\rho + \left(\frac{\partial T}{\partial e}\right)_\rho \mathrm{d}e . \tag{5.106}$$

L'algorithme itératif de Newton s'exprime ainsi :

$$\begin{aligned} P^{i+1} &\approx P^i + \overline{\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_e} \left(\rho^{n+1} - \overline{\rho}\right) + \overline{\left(\frac{\partial P}{\partial e}\right)_\rho} \left(e^{n+1} - \overline{e}\right) , \\ T^{i+1} &\approx T^i + \overline{\left(\frac{\partial T}{\partial \rho}\right)_e} \left(\rho^{n+1} - \overline{\rho}\right) + \overline{\left(\frac{\partial T}{\partial e}\right)_\rho} \left(e^{n+1} - \overline{e}\right) . \end{aligned} \tag{5.107}$$

Les notations $\overline{\bullet}$ correspondent à des grandeurs moyennes pour le fluide calculées à chaque sous-itération de l'algorithme à partir de P^i, T^i et Y_j^{n+1} :

$$\left\{\overline{\rho}, \overline{e}, \overline{\left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z}\right\} = f\left(P^i, T^i, Y_j^{n+1}\right) . \tag{5.108}$$

Les grandeurs Y_j^{n+1}, ρ^{n+1} et e^{n+1} sont figées au cours de l'exécution de l'algorithme, tandis que les états P^i et T^i sont initialisés à P^n et T^n puis remplacés au début de chaque sous-itération par les valeurs P^{i+1} et T^{i+1} précédemment calculées. Lorsque les différences $|P^{i+1} - P^i|$ et $|T^{i+1} - T^i|$ entre deux itérations successives deviennent inférieures

à la précision souhaitée, la convergence est supposée atteinte. L'algorithme est stoppé, et les états P^{i+1} et T^{i+1} sont affectés à P^{n+1} et T^{n+1}.

Il est ainsi nécessaire de connaitre les dérivées partielles de la pression et de la température par rapport à la masse volumique et l'énergie interne. En pratique, celles-ci sont plutôt exprimées en fonctions de dérivées partielles par rapport à la température et la pression, qui conduisent à des paramètres physiques plus facilement mesurables. La méthode des Jacobiens introduite en § 5.5.1 permet d'exprimer ces différentes dérivées partielles entre elles. Ainsi, d'après la relation (5.104), en posant $(\alpha, \beta) = (T, P)$, et en prenant $x = P$ puis $x = T$, avec $(y, z) = (\rho, e)$ et $(y, z) = (e, \rho)$, il vient après calcul :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_e = \frac{1}{\Delta}\left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_P , \qquad \left(\frac{\partial P}{\partial e}\right)_\rho = -\frac{1}{\Delta}\left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P , \qquad \left(\frac{\partial T}{\partial \rho}\right)_e = -\frac{1}{\Delta}\left(\frac{\partial e}{\partial P}\right)_T , \qquad \left(\frac{\partial T}{\partial e}\right)_\rho = \frac{1}{\Delta}\left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_T , \tag{5.109}$$

où nous avons posé

$$\Delta = \left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_T \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_P - \left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P \left(\frac{\partial e}{\partial P}\right)_T > 0 , \tag{5.110}$$

et abandonné provisoirement la notation $\overline{\bullet}$, que nous reprendrons au paragraphe § 5.5.5 au moment d'introduire les valeurs moyennes pour le fluide. Il reste à déterminer les dérivées partielles de l'énergie interne et de la masse volumique par rapport à la pression et la température. Pour cela, il faut d'abord choisir une modélisation thermodynamique pour chacune des phases, puis définir une loi de mélange pour le fluide permettant d'obtenir les valeurs moyennes $\overline{\bullet}$. Ceci fait l'objet des paragraphes § 5.5.3, § 5.5.4 et § 5.5.5.

5.5.3 Modélisation thermodynamique de la phase gazeuse

Loi d'état des gaz parfaits

La loi d'état des gaz parfaits est utilisée ici pour modéliser le comportement de la phase gazeuse du fluide. Sa validité se limite aux pressions modérées, pour lesquelles on peut négliger les interactions moléculaires de type Van der Waals. La loi d'état des gaz parfaits relie la pression, la température et la masse volumique selon la relation (5.111), où le facteur de volume r ne dépend que de la constante des gaz parfaits $R = 8,314\ \mathrm{J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}}$ et de la masse molaire M.

$$P = \rho r T \qquad ; \qquad r = \frac{R}{M} = \text{cste} \tag{5.111}$$

Relation énergétique

On peut montrer que la loi d'état des gaz parfaits implique que l'énergie interne ne dépend que de la température. En effet, d'après les relations (5.97), (5.101) et (5.111), nous avons :

$$\left(\frac{\partial e}{\partial v}\right)_T = l_v - P = T\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_\rho - P = \rho r T - P = 0 , \tag{5.112}$$

$$\left(\frac{\partial e}{\partial P}\right)_T = \left(\frac{\partial h}{\partial P}\right)_T - \left(\frac{\partial (Pv)}{\partial P}\right)_T = l_p + v - \left(\frac{\partial (rT)}{\partial P}\right)_T = -T\left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_P + v - 0 = 0 . \tag{5.113}$$

D'un point de vue physique, l'énergie interne correspond à l'agitation thermique et aux énergies d'interactions microscopiques. Or, par définition d'un gaz parfait, les énergies d'interaction sont constantes. Ainsi, l'agitation thermique ne dépendant que de la température, il en est de même pour l'énergie interne d'un gaz parfait. La dérivée partielle de l'énergie interne par rapport à la température exprimée en (5.97) est donc ici une dérivée totale. En intégrant à partir d'un état de référence à la température T_0, il vient :

$$e(T) = e(T_0) + \int_{T_0}^{T} c_v(T)\, \mathrm{d}T . \tag{5.114}$$

Cependant, dans le formalisme de la bibliothèque thermodynamique de CEDRE, ce sont les chaleurs spécifiques à pression constante c_p qui sont stockées. Elles sont modélisées par des polynômes de degré n, fonctions de la température :

$$c_p(T) = \sum_{k=0}^{n} a_k (T/T_{ech})^k , \tag{5.115}$$

où T_{ech} est une échelle de température, et où les coefficients a_k sont obtenus pour chaque espèce à partir d'une base de données thermodynamique. Ainsi, on détermine d'abord l'enthalpie spécifique par intégration de la deuxième équation référencée en (5.97) :

$$h(T) = h(T_0) + \int_{T_0}^{T} c_p(T)\, \mathrm{d}T . \tag{5.116}$$

L'énergie interne est ensuite déduite grâce à la relation :

$$e(T) = h(T) - \frac{P}{\rho} = h(T) - rT \,. \tag{5.117}$$

Calcul des dérivées partielles utiles

En appliquant la quatrième équation référencée en (5.102) à $(x, y, z, t) = (e, T, P, \rho)$, et puisque l'énergie interne ne dépend que de T, nous obtenons :

$$\left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_P = \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_\rho + \left(\frac{\partial e}{\partial \rho}\right)_T \cdot \left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P = \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_\rho = c_v\,(T) = c_p\,(T) - r \,. \tag{5.118}$$

Ajouté à un simple calcul à partir de la loi d'état (5.111), ceci permet d'établir les relations (5.119), nécessaires au changement de variables $\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{U}) \Leftrightarrow \boldsymbol{U}(\boldsymbol{Q})$.

$$\left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_P = c_v\,(T) \quad ; \quad \left(\frac{\partial e}{\partial P}\right)_T = 0 \quad ; \quad \left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P = -\frac{P}{rT^2} = -\frac{\rho}{T} \quad ; \quad \left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_T = \frac{1}{rT} = \frac{\rho}{P} \tag{5.119}$$

Notons alors que l'expression des coefficients thermoélastiques définis en (5.98) devient ici simplement :

$$\alpha = \frac{1}{T} \,, \qquad \beta_T = \frac{1}{P} \,. \tag{5.120}$$

Calcul de la vitesse du son

D'après la loi de Laplace, la compression ou dilatation isentropique d'un gaz parfait vérifie la relation :

$$\frac{P}{\rho^\gamma} = \text{cste} \,. \tag{5.121}$$

Il vient alors :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_S = \text{cste} \cdot \gamma\, \rho^{\gamma-1} = \text{cste} \cdot \frac{\gamma\, \rho^\gamma}{\rho} = \gamma \frac{P}{\rho} \,. \tag{5.122}$$

Ainsi, d'après la définition (5.99), la vitesse du son d'un gaz parfait s'exprime :

$$c = \sqrt{\gamma \frac{P}{\rho}} = \sqrt{\gamma r T} \,. \tag{5.123}$$

5.5.4 Modélisation thermodynamique de la phase liquide

Loi d'état de liquide compressible

La bibliothèque de thermodynamique de CEDRE dispose d'une loi d'état pour traiter les espèces liquides compressibles. Elle relie la masse volumique à la pression et à la température de la manière suivante :

$$\rho(P, T) = \rho_0 \frac{1 + \beta_0 (P - P_0)}{1 + \alpha_0 (T - T_0)} \,, \qquad \alpha_0 |T - T_0| \ll 1 \,, \qquad \beta_0 |P - P_0| \ll 1 \,. \tag{5.124}$$

Dans cette relation, (ρ_0, P_0, T_0) désigne un état de référence, α_0 et β_0 représentent respectivement les coefficients thermoélastiques de dilatation isobare et de compressibilité isotherme, évalués à l'état de référence. Cette loi d'état n'est valable que pour de faibles variations autour de l'état de référence. De manière équivalente, on peut exprimer le volume massique en fonction de P et T :

$$v(P, T) = v_0 \frac{1 + \alpha_0 (T - T_0)}{1 + \beta_0 (P - P_0)} = \frac{1}{\rho(P, T)} \,. \tag{5.125}$$

Relation énergétique

Contrairement aux gaz parfaits, l'énergie interne d'un liquide dépend *a priori* de la température et de la pression. Afin d'obtenir la relation $e(T, P)$, nous allons intégrer dans un premier temps la forme différentielle (5.126) sur l'enthalpie, de manière à suivre le formalisme de CEDRE.

$$\mathrm{d}h = \left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_P \mathrm{d}T + \left(\frac{\partial h}{\partial P}\right)_T \mathrm{d}P = c_p(T)\mathrm{d}T + \Big[l_p(T, P) + v(T, P)\Big]\mathrm{d}P \tag{5.126}$$

L'enthalpie $h(T,P)$ est un potentiel thermodynamique, sa forme différentielle est donc ***exacte***, et par suite elle est ***fermée*** [11], et donc intégrable. Pour ce faire, la méthode classique consiste à intégrer $\left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_P$ en maintenant P constante. On obtient ainsi $h(T,P)$ à une fonction de P près :

$$h(T,P) = \int_T c_p(T)\mathrm{d}T + f(P)\,. \tag{5.127}$$

Il reste ensuite à dériver cette relation par rapport à P, en maintenant T constante, et à l'identifier à la relation (5.126) :

$$\left(\frac{\partial h}{\partial P}\right)_T = 0 + f'(P) = l_p(T,P) + v(T,P)\,. \tag{5.128}$$

On obtient ensuite par intégration $f(P)$:

$$f(P) = \int_P \Big[l_p(T,P) + v(T,P)\Big]\mathrm{d}P + f_0\,, \tag{5.129}$$

où f_0 est une constante. Or, d'après la relation (5.101) et la loi d'état (5.125), nous avons :

$$l_p + v = -T\left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_P + v = -T\frac{v_0\alpha_0}{1+\beta_0(P-P_0)} + v_0\frac{1+\alpha_0(T-T_0)}{1+\beta_0(P-P_0)} = v_0\frac{1-\alpha_0T_0}{1+\beta_0(P-P_0)}\,. \tag{5.130}$$

L'intégration par rapport à la pression conduit donc à :

$$f(P) = \frac{v_0}{\beta_0}(1-\alpha_0T_0)\ln\Big[1+\beta_0(P-P_0)\Big] + f_0\,. \tag{5.131}$$

Finalement, en identifiant la constante f_0 à l'enthalpie de référence $h_0 = h(T_0,P_0)$, l'expression suivante est obtenue pour l'enthalpie :

$$h(T,P) = h_0 + \int_{T_0}^{T} c_p(T)\mathrm{d}T + \frac{v_0}{\beta_0}(1-\alpha_0T_0)\ln\Big[1+\beta_0(P-P_0)\Big]\,. \tag{5.132}$$

L'énergie interne s'obtient alors de façon immédiate :

$$e(T,P) = h(T,P) - Pv = h_0 + \int_{T_0}^{T} c_p(T)\mathrm{d}T + \frac{v_0}{\beta_0}(1-\alpha_0T_0)\ln\Big[1+\beta_0(P-P_0)\Big] - Pv_0\frac{1+\alpha_0(T-T_0)}{1+\beta_0(P-P_0)}\,. \tag{5.133}$$

Exprimée en fonction de ρ, elle s'écrit encore :

$$e(T,P) = h_0 + \int_{T_0}^{T} c_p(T)\mathrm{d}T + \frac{1}{\beta_0\rho_0}(1-\alpha_0T_0)\ln\Big[1+\beta_0(P-P_0)\Big] - \frac{P}{\rho}\,. \tag{5.134}$$

Comme pour les gaz parfaits, la chaleur spécifique $c_p(T)$ est une donnée stockée sous la forme d'un polynôme de la température selon la relation (5.115).

Calcul des dérivées partielles utiles

A partir de la loi d'état (5.125), on obtient par le calcul les dérivées partielles de la masse volumique :

$$\left(\frac{\partial\rho}{\partial P}\right)_T = \frac{\beta_0\rho_0}{1+\alpha_0(T-T_0)}\,, \tag{5.135}$$

$$\left(\frac{\partial\rho}{\partial T}\right)_P = -\alpha_0\rho_0\frac{1+\beta_0(P-P_0)}{\big[1+\alpha_0(T-T_0)\big]^2} = \frac{-\alpha_0\rho}{1+\alpha_0(T-T_0)}\,. \tag{5.136}$$

De même, à partir de la relation (5.134), on obtient les dérivées partielles de l'énergie interne :

$$\left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_P = c_p(T) - \frac{P}{\rho_0}\frac{\alpha_0}{1+\beta_0(P-P_0)}\,, \tag{5.137}$$

$$\left(\frac{\partial e}{\partial P}\right)_T = \frac{\beta_0P(1-\alpha_0T_0) - \alpha_0T(1-\beta_0P_0)}{\rho_0\big[1+\beta_0(P-P_0)\big]^2}\,. \tag{5.138}$$

Les coefficients thermoélastiques définis en (5.98) s'expriment alors sous la forme :

$$\alpha(T) = \frac{\alpha_0}{1+\alpha_0(T-T_0)} \qquad ; \qquad \beta_T(P) = \frac{\beta_0}{1+\beta_0(P-P_0)}\,. \tag{5.139}$$

11. Une forme différentielle $\mathrm{d}f = P(x,y)\mathrm{d}x + Q(x,y)\mathrm{d}y$ est fermée si elle vérifie : $\frac{\partial P(x,y)}{\partial y} = \frac{\partial Q(x,y)}{\partial x}$.

Calcul de la vitesse du son

D'après la relation de Mayer (5.100), la définition du rapport des chaleurs massiques (5.100), la définition thermodynamique de la vitesse du son (5.99), ainsi que les expressions (5.135), (5.136) et (5.139) obtenues dans la section précédente, il vient :

$$c_p - c_v = \frac{\alpha_0^2}{\beta_0 \rho_0} \frac{T}{1 + \alpha_0 (T - T_0)} , \tag{5.140}$$

$$\gamma = \frac{c_p}{c_p - (c_p - c_v)} , \tag{5.141}$$

$$c = \frac{1 + \alpha_0 (T - T_0)}{\sqrt{\beta_0 \rho_0 \Big[1 + \alpha_0 (T - T_0)\Big] - \alpha_0^2 T / c_p}} . \tag{5.142}$$

Limites de validité de la loi d'état

Comme cela a été évoqué en § 5.5.4, le domaine de validité de la loi d'état de liquide compressible est restreint au voisinage proche de l'état de référence. Nous allons préciser ici comment se caractérisent les problèmes lorsque l'on sort de cette zone de validité. Ceci a un impact déterminant sur la stratégie que nous devrons finalement adopter pour les simulations numériques, quant à la description thermodynamique de l'oxygène liquide (voir la conclusion de l'Annexe D).

Comme nous l'avons vu, le modèle à 4 équations implique la mise à l'équilibre thermique instantanée lorsque des espèces différentes sont mélangées, que ce soit par diffusion moléculaire ou par diffusion artificielle (numérique). C'est précisément ce que fait l'algorithme de Newton décrit précédemment. Malheureusement, ***l'unique température ainsi générée peut s'avérer être en dehors des limites de validité des relations thermodynamiques***, pour l'une ou l'autre des espèces. Dans ce cas, le calcul de certaines relations et propriétés thermodynamiques est ensuite erroné voire impossible. C'est typiquement ce qu'il peut se produire lorsque l'on cherche à évaluer la relation de Mayer, par exemple dans le but de déterminer le coefficient isentropique γ et finalement la vitesse du son. Afin d'illustrer cela, supposons une espèce suivant la loi d'état de liquide compressible, et dont les paramètres physiques prennent les valeurs du Tableau 5.2. Ces données sont typiquement celles de l'oxygène liquide dans les configurations qui nous intéressent.

Un premier problème apparait dans l'évaluation de la chaleur spécifique à pression constante. En effet, comme précisé précédemment, les chaleurs spécifiques à pression constante sont des données stockées dans CEDRE sous la forme de polynômes de la température, tels que la relation (5.115). Cependant, les coefficients de ces polynômes ne sont valides que sur une plage de température donnée. Si l'on prend l'exemple de l'oxygène liquide, il est possible de déterminer un polynôme qui approche au mieux les données expérimentales fournissant la chaleur spécifique en fonction de la température. Or, l'oxygène n'est sous forme liquide qu'entre 55 et 120K environ sous une pression de 10 bar. Le polynôme que l'on génère est donc valide sur cette plage réduite de température. Il s'ensuit que les valeurs de ce polynôme à des températures de plusieurs centaines de kelvin ont toutes les chances d'être totalement erronées. Une solution simple pour éviter cela consiste à supposer une chaleur spécifique indépendante de la température, et donc à utiliser un polynôme de degré 0, au moins pour les températures qui sortent de la zone de validité.

T_0	P_0	$c_{p,0}$	ρ_0	α_0	β_0
85	10^6	1684	1168	$4,12 \cdot 10^{-3}$	$1,71 \cdot 10^{-9}$

TABLEAU 5.2 – ***Exemple de paramètres physiques de l'oxygène liquide (unités S.I.).***

La chaleur spécifique c_p est donc supposée ici constante. Que se passe-t-il alors si l'on cherche à évaluer la vitesse du son à une pression P identique à la pression de référence P_0 (pour simplifier), mais à une température T différente de T_0, résultat de l'homogénéisation immédiate de la température lors du mélange avec des espèces gazeuses ? Dans ce cas, d'après la relation (5.139) le coefficient de compressibilité isotherme β_T reste constant et égal à β_0. En revanche, la masse volumique, le coefficient de dilatation isobare, la différence des chaleurs massiques, le rapport des chaleurs massiques, et donc finalement la vitesse du son, varient respectivement avec la température selon les relations (5.124), (5.139), (5.140), (5.141), et (5.142).

La Figure 5.3 représente l'évolution de ces variables en fonction de la température. On constate qu'il existe une température limite à laquelle le rapport des chaleurs massiques γ, calculé à partir de la relation de Mayer, devient infini. Cette asymptote verticale concerne également la vitesse du son. Cette température, que l'on note par

exemple $\widetilde{T}$, est celle qui annule le dénominateur dans les relations (5.141) et (5.142). Elle est donc obtenue par la relation :

$$\widetilde{T} = (1 - \alpha_0 T_0)\left(\frac{\alpha_0^2}{c_p \rho_0 \beta_0} - \alpha_0\right)^{-1} . \tag{5.143}$$

L'application numérique utilisant les données du Tableau 5.2 donne la valeur $\widetilde{T} \approx 703$ K, que l'on retrouve effectivement sur la Figure 5.3. Par ailleurs, cette valeur $\widetilde{T}$ n'est autre que la valeur limite au-delà de laquelle on enfreint la règle thermodynamique :

$$\gamma \geq 1 \quad \Leftrightarrow \quad 0 < c_v \leq c_p . \tag{5.144}$$

Cependant, on constate sur la Figure 5.3 que les problèmes risquent de survenir également à des températures

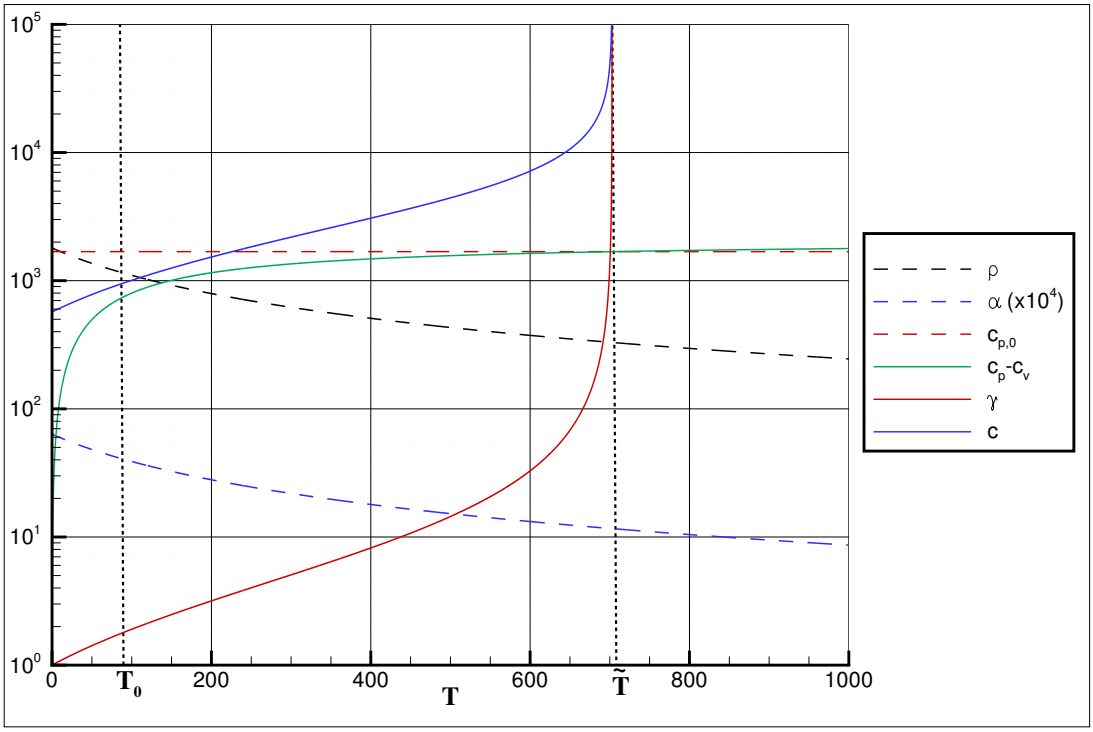


FIGURE 5.3 – ***Evolution de grandeurs physiques en fonction de la température pour l'oxygène liquide suivant la loi d'état de liquide compressible.***

$T_0 < T < \widetilde{T}$, dès lors que γ et la vitesse du son s'éloignent significativement des valeurs à l'état de référence. On note par exemple que l'on obtient une vitesse du son environ trois fois supérieure à la valeur de référence pour $T = 400K$. Or l'augmentation fictive de la vitesse du son pose évidemment problème, notamment quant à la stabilité des schémas numériques, le critère CFL devenant de plus en plus restrictif (cf. Chapitre 8). Par ailleurs, il en est de même concernant la masse volumique, qui est par exemple inférieure de moitié à la valeur de référence pour $T = 400K$.

Une solution immédiate permettant d'éviter ce type de problèmes consiste simplement à considérer l'espèce liquide comme indilatable et donc à prendre $\alpha_0 = 0$. Le liquide est alors supposé uniquement compressible, ce qui contredit la physique, les liquides étant bien plus dilatables que compressibles. C'est néanmoins la solution qui a finalement été retenue pour mener à bien les simulations numériques dans cette étude. Pour plus de détails à ce sujet, se reporter à la dernière section de l'Annexe D, où est détaillée la stratégie retenue quant à la description thermodynamique de l'oxygène liquide dans les simulations numériques. Dans l'immédiat, et notamment dans ce qui suit, nous nous en tenons à la loi d'état générale "dilatable-compressible" présentée dans cette section.

5.5.5 Lois de mélange

Nous venons de déterminer l'expression des dérivées partielles de l'énergie interne et de la masse volumique, pour les espèces de type gaz parfait qui constituent la phase gazeuse de notre fluide, ainsi que pour l'espèce oxygène liquide qui en constitue la phase liquide. Il reste désormais à établir une loi de mélange afin d'obtenir des valeurs moyennes pour le fluide, permettant ainsi la résolution de l'algorithme itératif de Newton défini en (5.107), et donc la fermeture du système d'équations de conservation. Pour exprimer la valeur moyenne de toute grandeur massique

$\overline{\varphi}(P,T)$, nous utilisons une moyenne pondérée par la fraction massique Y_i de chaque espèce :

$$\overline{\varphi}(P,T) = \sum_{i=1}^{N_t} Y_i\,\varphi_i(P,T)\,, \qquad \varphi = \left\{c_p, c_v, \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_P, \left(\frac{\partial e}{\partial P}\right)_T, ...\right\}\,, \tag{5.145}$$

où $\varphi_i(P,T)$ désigne la même grandeur calculée pour l'espèce i. Nous ne considérons pas ici de terme additionnel prenant en compte les effets de mélange, et nous plaçons donc dans le cadre de l'hypothèse de mélange idéal. Cette expression permet ainsi d'obtenir, entre autres, les valeurs moyennes des chaleurs spécifiques et des dérivées partielles de l'énergie interne. En revanche, elle ne permet pas d'obtenir des grandeurs qui ne sont pas massiques, telles que les dérivées partielles de la masse volumique, ou la vitesse du son moyenne. Pour cela, la stratégie adoptée dans CEDRE consiste à introduire le paramètre $\mathcal{R}$, défini indépendamment des lois d'état par :

$$\mathcal{R} = \frac{P}{\rho T} \quad \text{[J/(kg.K)]}\,. \tag{5.146}$$

Appliquée aux gaz parfaits, cette relation conduit immédiatement à :

$$\mathcal{R} = r\,, \qquad \left(\frac{\partial \mathcal{R}}{\partial P}\right)_T = \left(\frac{\partial \mathcal{R}}{\partial T}\right)_P = 0\,. \tag{5.147}$$

Tandis que dans le cas de la loi d'état de liquide compressible, nous avons :

$$\mathcal{R} = \frac{P}{\rho_0 T}\frac{1+\alpha_0(T-T_0)}{1+\beta_0(P-P_0)}\,, \tag{5.148}$$

puis

$$\left(\frac{\partial \mathcal{R}}{\partial P}\right)_T = \frac{1}{\rho T}\frac{1-\beta_0 P_0}{1+\beta_0(P-P_0)}\,, \qquad \left(\frac{\partial \mathcal{R}}{\partial T}\right)_P = -\frac{P}{\rho T^2}\frac{1-\alpha_0 T_0}{1+\alpha_0(T-T_0)}\,. \tag{5.149}$$

Le paramètre $\mathcal{R}$ ainsi que ses dérivées partielles sont des grandeurs massiques, dont on peut obtenir des valeurs moyennes $\overline{\bullet}$ pour le fluide en utilisant la relation (5.145) :

$$\overline{\mathcal{R}} = \sum_{i=1}^{N_t} Y_i\,\mathcal{R}_i\,, \qquad \overline{\left(\frac{\partial \mathcal{R}}{\partial P}\right)_T} = \sum_{i=1}^{N_t} Y_i \left(\frac{\partial \mathcal{R}_i}{\partial P}\right)_T\,, \qquad \overline{\left(\frac{\partial \mathcal{R}}{\partial T}\right)_P} = \sum_{i=1}^{N_t} Y_i \left(\frac{\partial \mathcal{R}_i}{\partial T}\right)_P\,. \tag{5.150}$$

Il est donc possible d'obtenir les valeurs moyennes pour les grandeurs non massiques, en les exprimant en fonction de $\mathcal{R}$ et de ses dérivées partielles. La masse volumique moyenne du fluide s'obtient par exemple :

$$\overline{\rho} = \frac{P}{\overline{\mathcal{R}}T}\,. \tag{5.151}$$

Les dérivées partielles de la masse volumique s'écrivent alors :

$$\overline{\left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_T} = \overline{\rho}\,\overline{\beta_T} = \overline{\left(\frac{\partial \frac{P}{\mathcal{R}T}}{\partial P}\right)_T} = \frac{\overline{\rho}}{P}\left[1 - \frac{P}{\overline{\mathcal{R}}}\overline{\left(\frac{\partial \mathcal{R}}{\partial P}\right)_T}\right]\,, \tag{5.152}$$

$$\overline{\left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P} = -\overline{\rho}\,\overline{\alpha} = \overline{\left(\frac{\partial \frac{P}{\mathcal{R}T}}{\partial T}\right)_P} = -\frac{\overline{\rho}}{T}\left[1 + \frac{T}{\overline{\mathcal{R}}}\overline{\left(\frac{\partial \mathcal{R}}{\partial T}\right)_P}\right]\,, \tag{5.153}$$

où l'on a fait apparaitre les coefficients thermoélastiques moyens pour le fluide.

Cas de la vitesse du son

La vitesse du son ne fait pas non plus partie des grandeurs que l'on peut obtenir par une simple moyenne des vitesses du son dans chaque phase. En réalité, dans les mailles de mélange, la vitesse du son moyenne au sein du fluide se trouve fortement modifiée en comparaison de sa valeur dans les phases pures. Elle peut même être significativement inférieure à la plus faible des deux valeurs. Ce résultat a été observé expérimentalement dans le cas d'écoulement diphasiques à inclusions dispersées (bulles de vapeur dans un liquide ou gouttes de liquide dans un gaz). Il est connu sous le nom de ***loi de Wallis*** (WALLIS [297]), et s'explique en considérant la masse volumique et la compressibilité moyennes du fluide. Exprimons la vitesse du son au sein du fluide à partir des relations (5.99), (5.100) et (5.152). Il vient :

$$\overline{c}^2 = \overline{\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_S} = \frac{1}{\overline{\rho}\,\overline{\beta_S}} = \frac{\overline{\gamma}}{\overline{\rho}\,\overline{\beta_T}}\,, \tag{5.154}$$

où la masse volumique et le coefficient de compressibilité isotherme moyens sont exprimés par les relations (5.151) et (5.152). Le coefficient adiabatique moyen $\overline{\gamma}$ s'obtient lui en utilisant la relation (5.100) :

$$\overline{\gamma} = \frac{\overline{c_p}}{\overline{c_v}} = \frac{\overline{c_p}}{\overline{c_p} - (\overline{c_p} - \overline{c_v})} = \left(1 - \frac{T\,\overline{\alpha}^2}{\overline{\rho}\,\overline{c_p}\,\overline{\beta_T}}\right)^{-1}, \tag{5.155}$$

où $\overline{\rho}$, $\overline{\beta_T}$ et $\overline{\alpha}$ sont respectivement obtenus par les équations (5.151), (5.152) et (5.153), tandis que $\overline{c_p}$ est une grandeur massique et peut donc être obtenu par la relation (5.145). Le Tableau 5.3 présente une application numérique du calcul de la vitesse du son, dans un milieu gazeux pur modélisé en gaz parfait, puis dans un milieu liquide pur, et enfin dans le mélange gaz-liquide à fractions massiques égales. Les conditions de pression et température sont les mêmes dans les trois cas, à savoir $P_1 = P_2 = P = 1$ bar et $T_1 = T_2 = T = 300$ K. De plus, pour la loi d'état de liquide compressible, on prend $P_0 = P$ et $T_0 = T$. Les valeurs du Tableau 5.3 qui résultent d'un calcul sont accompagnées de la référence de l'équation utilisée entre parenthèses. Les autres valeurs sont des données.

Nous constatons qu'en comparaison du cas où la phase liquide est pure par exemple, la masse volumique moyenne du fluide diphasique est moindre. Cette modification, seule, tendrait à augmenter la vitesse du son. Mais dans le même temps, la compressibilité moyenne du mélange est quasiment égale à celle du gaz pur, donc très fortement supérieure à celle du liquide pur, ce qui a pour effet de diminuer la vitesse du son. Dans les faits, le second effet l'emporte sur le premier (l'écart entre les compressibilités est supérieur à l'écart entre les densités), d'où une vitesse du son moindre dans le mélange.

Phase gazeuse pure	Phase liquide pure	Mélange diphasique $Y_1 = Y_2 = 0,5$
$\rho_1 = 1$	$\rho_2 = \rho_0 = 1000$	$\overline{\rho} = 500.5$ (5.151)
$c_{p,1} = 1000$	$c_{p,2} = 4000$	$\overline{c_p} = 2500$ (5.145)
$\mathcal{R}_1 \approx 333$ (5.111)	$\mathcal{R}_2 \approx 0.333$ (5.148)	$\overline{\mathcal{R}} \approx 166.833$ (5.150)
$\left(\frac{\partial \mathcal{R}}{\partial P}\right)_{T,1} = 0$ (5.147)	$\left(\frac{\partial \mathcal{R}}{\partial P}\right)_{T,2} \approx 3.33\ 10^{-6}$ (5.149)	$\overline{\left(\frac{\partial \mathcal{R}}{\partial P}\right)_{T}} \approx 1.67\ 10^{-6}$ (5.150)
$\left(\frac{\partial \mathcal{R}}{\partial T}\right)_{P,1} = 0$ (5.147)	$\left(\frac{\partial \mathcal{R}}{\partial T}\right)_{P,2} \approx -1.011\ 10^{-3}$ (5.149)	$\overline{\left(\frac{\partial \mathcal{R}}{\partial T}\right)_{P}} \approx -5.056\ 10^{-4}$ (5.150)
$\alpha_1 = 3.33\ 10^{-3}$ (5.120)	$\alpha_2 = \alpha_0 = 3\ 10^{-4}$	$\overline{\alpha} \approx 3.33\ 10^{-3}$ (5.153)
$\beta_{T,1} = 10^{-5}$ (5.120)	$\beta_{T,2} = \beta_0 = 5\ 10^{-10}$	$\overline{\beta_T} \approx 10^{-5}$ (5.152)
$\gamma_1 \approx 1.5$ (5.140), (5.141)	$\gamma_2 \approx 1.01$ (5.140), (5.141)	$\overline{\gamma} \approx 1$ (5.155)
$c_1 \approx 374$ (5.123)	$c_2 \approx 1424$ (5.142)	$\overline{c} \approx 14$ (5.154)

TABLEAU 5.3 – ***Vitesse du son dans un gaz pur, un liquide pur, et un milieu diphasique. Exemple d'application numérique (unités SI).***

Pour terminer, il est important de souligner que dans notre étude la notion de mélange diphasique n'a pas de réalité physique ***au sein du fluide seul***, tel que nous l'avons défini. Il s'agit d'un artefact causé par la diffusion numérique. En réalité, les phases séparées sont non miscibles et il existe toujours une interface qui délimite clairement la phase liquide de la phase gazeuse. En conséquence, la vitesse du son dans la zone de phases séparées n'atteint jamais les faibles valeurs générées par la diffusion numérique. En revanche, la notion de mélange diphasique a bien une réalité physique ***en dehors du seul fluide***, notamment lorsque l'on considère un volume de contrôle décrivant des gouttes de liquide dispersées au sein de la phase gazeuse du fluide. Dans ce cas, on observerait physiquement une vitesse du son moyenne dans le volume de contrôle qui atteint les faibles valeurs prédites par la loi de Wallis. Malheureusement, ce phénomène n'est pas retranscrit par le calcul. En effet, la vitesse du son est calculée dans le code uniquement à partir des propriétés de la phase gazeuse, sans prendre en compte la présence éventuelle d'une phase dispersée (le solveur CHARME ne tenant pas compte du volume occupé par la phase dispersée).

5.5.6 Problèmes de robustesse liés à la fermeture thermodynamique du système fluide

Au-delà des difficultés évoquées en § 5.5.4 concernant la validité de la loi d'état de liquide compressible, il existe un autre problème lié à la fermeture thermodynamique du système fluide. Il s'agit d'un phénomène bien

connu dans le cadre du modèle à 4 équations (ABGRALL et KARNI [3]), susceptible de mettre en péril la robustesse et la précision des simulations. Des oscillations de pression non physiques apparaissent lors de la mise en contact de deux espèces de compressibilité différente, initialement à des températures différentes. Dans le cas qui nous intéresse, le problème survient typiquement lors de la mise en contact par diffusion numérique de l'espèce oxygène liquide à très basse température avec le mélange gazeux environnant à haute température.

Une analyse détaillée de ce phénomène numérique est présentée en Annexe D, dans le cadre du formalisme de la bibliothèque thermodynamique de CEDRE. La stratégie adoptée afin de limiter l'apparition des oscillations de pression lors de la simulation numérique du banc Mascotte (cf. Chapitre 11) est également précisée en fin d'Annexe D.

Chapitre 6

Modélisation eulérienne de la phase dispersée avec le solveur SPIREE

Ce chapitre présente la modélisation retenue pour décrire la phase dispersée. Comme expliqué au Chapitre 4, nous optons pour une description eulérienne basée sur le solveur SPIREE du code CEDRE. Nous avons vu au Chapitre 3 qu'un certain nombre de modèles eulériens ont été développés dans la littérature. Nous précisons donc ici quelles sont les équations précisément retenues en rappelant leur origine. Ces équations sont également notées sous forme vectorielle et leur lien avec les équations du fluide est précisé. Ainsi la modélisation des termes sources et les méthodes numériques de résolution, qui font respectivement l'objet du Chapitre 7 et du Chapitre 8, pourront être plus facilement introduites.

Sommaire

6.1 Choix d'un modèle eulérien pour la phase dispersée 111
6.2 Formulation vectorielle 112
6.2.1 Variables naturelles et quantités conservées 112
6.2.2 Flux et termes sources 113
6.2.3 Système des équations de conservation 113
6.3 Système d'équations global regroupant le fluide et la phase dispersée 114

6.1 Choix d'un modèle eulérien pour la phase dispersée

Nous avons vu au paragraphe § 3.4.3 du Chapitre 3 que l'équation cinétique de Williams-Boltzmann, décrivant l'évolution de la fonction densité de probabilité en nombre de gouttes, constitue le point de départ de tous les modèles eulériens. Ensuite, une première étape de réduction de l'espace des phases est opérée. Elle consiste à intégrer l'équation cinétique sur les variables vitesse et température, et conduit à un système d'équations appelé ***système semi-cinétique***. A partir de cette étape, différents modèles peuvent être construits. Ils dépendent de :

– la forme présumée des distributions en vitesse et en température des gouttes. Tous les modèles disponibles à l'heure actuelle dans le solveur SPIREE sont basés sur une hypothèse de dispersion nulle, que ce soit en vitesse ou en température. A un instant donné, toutes les gouttes d'une taille donnée et situées dans un même volume de contrôle sont donc supposées avoir la même vitesse et la même température.

– la forme présumée de la distribution en taille des gouttes. Parmi les différents modèles de la littérature présentés au Chapitre 3, le solveur SPIREE dispose à l'heure actuelle des modèles ***bi-fluide*** et ***multi-classes***, ainsi que de modèles ***sectionnels*** d'ordre 2 avec reconstruction ***affine*** ou ***exponentielle***.

L'objectif final de cette étude étant la simulation de la configuration Mascotte présentée au Chapitre 1, il est a priori nécessaire que le modèle retenu soit compatible avec la description des phénomènes suivants :

– atomisation primaire,
– fragmentation secondaire,
– coalescence,
– évaporation.

Tous les modèles disponibles dans SPIREE sont capables de traiter l'évaporation. En revanche, les phénomènes d'interactions entre gouttes tels que la fragmentation secondaire et la coalescence ne sont traités que par les méthodes sectionnelles. Quant au modèle d'atomisation primaire, il n'existe pas encore puisque son développement constitue un des objectifs de cette étude (cf. Chapitre 10). Néanmoins, il est possible d'anticiper d'ores et déjà qu'il semble plus pertinent de penser un modèle d'atomisation primaire dans un cadre sectionnel, prenant en compte l'ensemble du spectre des tailles de gouttes. En effet, des gouttes de taille quelconque sont susceptibles d'être générées par l'atomisation primaire. Par ailleurs, nous choisissons d'ignorer les phénomènes de coalescence entre gouttes dans un souci d'alléger le coût des simulations, bien que des modèles de coalescence existent dans SPIREE (cf. DOISNEAU [71] et DOISNEAU et al. [69]). Dans un même souci d'alléger le coût des simulations, nous allons privilégier l'approche sectionnelle avec reconstruction affine plutôt que celle avec reconstruction exponentielle.

En résumé, l'approche retenue dans le cadre de notre stratégie globale de couplage diphasique est la méthode ***sectionnelle d'ordre 2 avec reconstruction affine***, dont les équations sont regroupées dans le système (6.1). Comparé au système (3.77) introduit au Chapitre 3, le système (6.1) inclut ici une équation sur l'énergie totale et non sur l'énergie interne, les termes $\widehat{Q}^{(k)}$ ont disparu puisque nous choisissons de négliger la coalescence, et un champ de force volumique lié à la gravité a été ajouté ($\boldsymbol{g}$ est l'accélération de la pesanteur) [1]. En outre, les termes de couplage $\mathcal{P}_N^{(k)}$, $\mathcal{P}_M^{(k)}$, $\mathcal{P}_V^{(k)}$ et $\mathcal{P}_E^{(k)}$ ont aussi été ajoutés. Ils représentent les transferts par atomisation primaire entre l'espèce oxygène liquide du fluide (solveur CHARME) et la phase dispersée (solveur SPIREE). Notons qu'un transfert inverse, de la phase dispersée vers l'espèce oxygène liquide de CHARME, est également envisageable. Physiquement, cela correspond par exemple à l'impact des gouttes sur le jet, ce que l'on appellera de la "pseudo-coalescence" pour ne pas faire de confusion avec la coalescence entre gouttes. Nous verrons également que ce terme peut potentiellement permettre de supprimer les accumulations intempestives de particules générés par les δ-chocs sur des maillages fins. Quoi qu'il en soit, l'expression des termes d'atomisation primaire est encore inconnue à ce stade. Leur modélisation constituant un des objectifs de l'étude, elle sera présentée spécifiquement au Chapitre 10.

1. On aura noté également que l'hypothèse de dispersion locale nulle en vitesse et en température nous permet d'écrire ici $\boldsymbol{v}^{(k)} = \overline{\boldsymbol{v}}^{(k)} = \widetilde{\boldsymbol{v}}^{(k)}$, $\theta^{(k)} = \overline{\theta}^{(k)} = \widetilde{\theta}^{(k)}$ et donc $e_T^{(k)} = \overline{e_T}^{(k)} = \widetilde{e_T}^{(k)}$.

$$
\left\{
\begin{array}{lcll}
\dfrac{\partial n^{(k)}}{\partial t} & + & \nabla\cdot\left(n^{(k)}\boldsymbol{v}^{(k)}\right) & = \widehat{\Gamma}_1^{(k)} + \mathcal{N}^{(k)} - \mathcal{N}^{(k-1)} + \mathcal{P}_N^{(k)} \\
\dfrac{\partial \alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}}{\partial t} & + & \nabla\cdot\left(\alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}\boldsymbol{v}^{(k)}\right) & = \widehat{\Gamma}_2^{(k)} + n^{(k)}\left(\mathcal{E}^{(k)} - \mathcal{E}^{(k-1)} - \dot{m}_v^{(k)}\right) + \mathcal{P}_M^{(k)} \\
\dfrac{\partial \alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}\boldsymbol{v}^{(k)}}{\partial t} & + & \nabla\cdot\left(\alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}\boldsymbol{v}^{(k)}\otimes\boldsymbol{v}^{(k)}\right) & = \widehat{\Gamma}_3^{(k)} + n^{(k)}\,\boldsymbol{F_{dr}}^{(k)} + \mathcal{P}_V^{(k)} + \alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}\,\boldsymbol{g} \\
 & & & + \; n^{(k)}\left(\boldsymbol{v}^{(k+1)}\,\mathcal{E}^{(k)} - \boldsymbol{v}^{(k)}\,\mathcal{E}^{(k-1)} - \boldsymbol{v}^{(k)}\dot{m}_v^{(k)}\right) \\
\dfrac{\partial \alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}e_T^{(k)}}{\partial t} & + & \nabla\cdot\left(\alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}e_T^{(k)}\boldsymbol{v}^{(k)}\right) & = \widehat{\Gamma}_4^{(k)} + n^{(k)}\,\boldsymbol{F_{dr}}^{(k)}\cdot\boldsymbol{v}^{(k)} + \mathcal{P}_E^{(k)} + \alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}\,\boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{v}^{(k)} \\
 & & & + \; n^{(k)}\,\Phi_c^{(k)} \\
 & & & + \; n^{(k)}\left(e_T^{(k+1)}\,\mathcal{E}^{(k)} - e_T^{(k)}\,\mathcal{E}^{(k-1)} - e_T^{(k)}\dot{m}_v^{(k)}\right)
\end{array}
\right. \tag{6.1}
$$

$$\mathbf{1 \leq k \leq N_s}$$

6.2 Formulation vectorielle

Les équations de conservation précédentes sont réécrites ici sous forme vectorielle, ce qui nous sera utile pour introduire les méthodes numérique de discrétisation au Chapitre 8.

6.2.1 Variables naturelles et quantités conservées

Le système (6.1) comprend des équations de conservation pour la densité en nombre de gouttes, la masse, la quantité de mouvement et l'énergie totale de chaque section. Ces quantités conservées peuvent être regroupées sous la forme d'un vecteur des quantités conservées, noté $\boldsymbol{Q_d^{(k)}}$:

$$\boldsymbol{Q_d^{(k)}} = \begin{pmatrix} n^{(k)} \\ \alpha^{(k)}\rho_0^{(k)} \\ \alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}\boldsymbol{v}^{(k)} \\ \alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}e_T^{(k)} \end{pmatrix}. \tag{6.2}$$

On définit ensuite le vecteur $\boldsymbol{U_d^{(k)}}$ des variables naturelles comme :

$$\boldsymbol{U_d^{(k)}} = \begin{pmatrix} D^{(k)} \\ \boldsymbol{v}^{(k)} \\ \theta^{(k)} \\ \alpha^{(k)} \end{pmatrix}. \tag{6.3}$$

Il existe un changement de variable bijectif entre $\boldsymbol{U_d^{(k)}}$ et $\boldsymbol{Q_d^{(k)}}$, dépendant notamment de lois d'état thermodynamiques, et de la définition du diamètre moyen :

$$
\begin{array}{lcllcl}
\alpha^{(k)} & = & \dfrac{\alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}}{\rho_0^{(k)}}, & \boldsymbol{v}^{(k)} & = & \dfrac{\alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}\boldsymbol{v}^{(k)}}{\alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}}, \\
D^{(k)} & = & \left(\dfrac{6}{\pi}\dfrac{\alpha^{(k)}}{n^{(k)}}\right)^{1/3}, & \theta^{(k)} & = & \dfrac{e_T^{(k)} - \dfrac{1}{2}\boldsymbol{v}^{(k)}\cdot\boldsymbol{v}^{(k)}}{c_p\left(\theta^{(k)}\right)}.
\end{array} \tag{6.4}
$$

Le calcul de la température nécessite un algorithme itératif puisque la capacité calorifique dépend a priori elle-même de la température. Le solveur SPIREE permet en effet à l'utilisateur de définir la masse volumique et la capacité calorifique des particules comme des polynômes de la température. A noter cependant que les termes de dilatation qui apparaissent en toute rigueur dans les équations (cf. Chapitre 3 et Annexe A) sont négligés dans le solveur SPIREE.

6.2.2 Flux et termes sources

Commençons par introduire le vecteur des flux convectifs, qui apparait au membre de gauche des équations de conservation :

$$\boldsymbol{F}_{\boldsymbol{d}}^{(\boldsymbol{k})} = \begin{pmatrix} n^{(k)}\boldsymbol{v}^{(k)} \\ \alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}\,\boldsymbol{v}^{(k)} \\ \alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}\,\boldsymbol{v}^{(k)}\otimes\boldsymbol{v}^{(k)} \\ \alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}\,e_T^{(k)}\,\boldsymbol{v}^{(k)} \end{pmatrix} = \boldsymbol{Q}_{\boldsymbol{d}}^{(\boldsymbol{k})} \otimes \boldsymbol{v}^{(k)}\,. \tag{6.5}$$

Introduisons ensuite le vecteur des termes sources $\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{d}}^{(\boldsymbol{k})}$:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{d}}^{(\boldsymbol{k})} = & \underbrace{\begin{pmatrix} \widehat{\Gamma}_1^{(k)} \\ \widehat{\Gamma}_2^{(k)} \\ \widehat{\Gamma}_3^{(k)} \\ \widehat{\Gamma}_4^{(k)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathcal{N}^{(k)} - \mathcal{N}^{(k-1)} \\ n^{(k)}\left(\mathcal{E}^{(k)} - \mathcal{E}^{(k-1)}\right) \\ n^{(k)}\left(\boldsymbol{v}^{(k+1)}\,\mathcal{E}^{(k)} - \boldsymbol{v}^{(k)}\,\mathcal{E}^{(k-1)}\right) \\ n^{(k)}\left(e_T^{(k+1)}\,\mathcal{E}^{(k)} - e_T^{(k)}\,\mathcal{E}^{(k-1)}\right) \end{pmatrix}}_{\textit{fragmentation et flux entre sections liés à l'évaporation}} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}\,\boldsymbol{g} \\ \alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}\,\boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{v}^{(k)} \end{pmatrix}}_{\textit{champ de force gravitationnelle}} \\ & + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 \\ -n^{(k)}\,\dot{m}_v^{(k)} \\ -n^{(k)}\,\boldsymbol{v}^{(k)}\,\dot{m}_v^{(k)} \\ -n^{(k)}\,e_T^{(k)}\dot{m}_v^{(k)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathcal{P}_N^{(k)} \\ \mathcal{P}_M^{(k)} \\ \mathcal{P}_V^{(k)} \\ \mathcal{P}_E^{(k)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ n^{(k)}\,\boldsymbol{F_{dr}}^{(k)} \\ n^{(k)}\,\boldsymbol{F_{dr}}^{(k)}\cdot\boldsymbol{v}^{(k)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ n^{(k)}\,\Phi_c^{(k)} \end{pmatrix}}_{\textit{couplage avec le fluide : évaporation, atomisation primaire, force de trainée, chauffage}}. \end{aligned} \tag{6.6}$$

Pour bien fixer les idées, nous avons décomposé ci-dessus les termes sources en trois catégories :

(i) les transferts entre les différentes sections du solveur SPIREE, liés à la fragmentation secondaire et à l'évaporation.

(ii) le champ de force gravitationnel.

(iii) les transferts entre la phase dispersée et le fluide, c'est-à-dire entre les solveurs SPIREE et CHARME. Il s'agit ici des transferts de masse par évaporation ou par atomisation primaire, et des transferts de quantité de mouvement, énergie et éventuellement densité en nombre de gouttes associés. Il s'agit également du transfert de quantité de mouvement dû à la force de traînée (on retrouve la puissance associée dans l'équation d'énergie totale), et du flux de chauffage des gouttes.

Pour la suite, il est utile de nommer les différents vecteurs qui apparaissent dans la décomposition précédente des termes sources. Nous verrons en effet au Chapitre 8 (cf. § 8.4) que la stratégie numérique d'intégration temporelle des systèmes d'équations passe par un découplage des différents sous-systèmes (méthode de splitting d'opérateurs). Nous écrivons donc :

$$\boxed{\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{d}}^{(\boldsymbol{k})} = \boldsymbol{S}_{\Gamma}^{(k)} + \boldsymbol{S}_{sec}^{(k)} + \boldsymbol{S}_{g}^{(k)} + \boldsymbol{S}_{vap}^{(k)} + \boldsymbol{S}_{\mathcal{P}}^{(k)} + \boldsymbol{S}_{drag}^{(k)} + \boldsymbol{S}_{\Phi}^{(k)}\,.} \tag{6.7}$$

Dans l'ordre de l'écriture ci-dessus, ces vecteurs regroupent respectivement les termes liés à :

- la fragmentation secondaire,
- l'évaporation (flux entre sections),
- la gravité,
- l'évaporation (transfert vers le fluide),
- l'atomisation primaire,
- la force de traînée,
- le flux de chauffage.

Les trois premiers termes sont internes au solveur SPIREE, tandis que les quatre derniers sont des termes de couplage avec le solveur CHARME.

6.2.3 Système des équations de conservation

Avec les notations précédemment introduites, le système des équations de conservation pour une section k s'écrit sous la forme vectorielle suivante :

$$\boxed{\frac{\partial \boldsymbol{Q}_d^{(k)}}{\partial t} + \nabla . \boldsymbol{F}_d^{(k)} = \boldsymbol{S}_d^{(k)} .} \qquad (6.8)$$

$$\mathbf{1} \leq \boldsymbol{k} \leq \boldsymbol{N_s}$$

Afin d'assurer la fermeture de ce système, il nous reste à détailler l'expression des termes sources, ce qui sera fait au Chapitre 7.

6.3 Système d'équations global regroupant le fluide et la phase dispersée

A ce stade de notre stratégie, nous avons choisi un modèle pour décrire le fluide, dont les équations ont été présentées au Chapitre 5. Et nous venons de choisir un modèle pour décrire la phase dispersée, dont les équations ont été écrites ci-dessus. Il est alors intéressant d'écrire le système d'équations global, regroupant les équations de conservation du fluide et celles de la phase dispersée. Ce système global est écrit en (6.11). Cela permet notamment de préciser la définition des termes de couplage avec la phase dispersée qui apparaissent dans les équations du fluide au Chapitre 5 (voir la relation (5.28) qui introduit le vecteur $\boldsymbol{S_{FD}}$ des termes sources de couplage). Ainsi, nous avons précisément :

$$\boxed{\begin{aligned}
S_M^g &= \sum_{k=1}^{N_s} n^{(k)} \dot{m}_v^{(k)} \\
S_M^l &= -\sum_{k=1}^{N_s} \mathcal{P}_M^{(k)} \\
\boldsymbol{S_U} &= -\sum_{k=1}^{N_s} n^{(k)} \boldsymbol{F_{dr}}^{(k)} - \sum_{k=1}^{N_s} \mathcal{P}_V^{(k)} + \sum_{k=1}^{N_s} n^{(k)} \boldsymbol{v}^{(k)} \dot{m}_v^{(k)} \\
S_E &= -\sum_{k=1}^{N_s} n^{(k)} \boldsymbol{F_{dr}}^{(k)} \cdot \boldsymbol{v}^{(k)} - \sum_{k=1}^{N_s} \mathcal{P}_E^{(k)} - \sum_{k=1}^{N_s} n^{(k)} \Phi_c^{(k)} + \sum_{k=1}^{N_s} n^{(k)} e_T^{(k)} \dot{m}_v^{(k)}
\end{aligned}} \qquad (6.9)$$

Par ailleurs, nous nous plaçons dès maintenant sous l'hypothèse que nous utiliserons pour la simulation numérique du Chapitre 11, à savoir ***celle d'une approche implicite de la turbulence***. Le système vectoriel des équations de conservations filtrées du fluide, écrit en (5.69) est donc quasiment équivalent au système des équations de conservation instantanées écrit en (5.29), puisque le vecteur des termes turbulents $\boldsymbol{F}_T$ est nul. Afin de simplifier les notations dans les chapitres suivants, nous pouvons donc remplacer dans les équations les variables filtrées par les variables instantanées. Cependant, les termes sources chimiques constituent une exception notable. En effet, même dans une approche implicite de la turbulence, il est nécessaire d'évaluer ces termes en utilisant un modèle de combustion turbulente, c'est-à-dire prenant en compte l'interaction de la chimie avec la turbulence (voir le paragraphe § 7.3 au Chapitre 7). Les taux de réaction chimiques seront donc toujours notés $\overline{\dot{\omega}_i}$ et non $\dot{\omega}_i$. De plus, rappelons également ici que les différentes espèces du fluide sont définies de la manière suivante :

$$\boxed{\begin{array}{ll}
1 \leq i \leq N_g - 1 & \text{espèce gazeuse quelconque} \\
i = N_g & \text{espèce oxygène gazeux } O_{2(g)} \\
i = N_t & \text{espèce oxygène liquide } O_{2(l)}
\end{array}} \qquad (6.10)$$

Pour conclure ce chapitre, apportons quelques précisons supplémentaires :

- L'écriture d'un seul système global est utile à la compréhension, notamment pour bien appréhender les différents termes de couplage et s'assurer de la conservativité. Néanmoins, il faut garder à l'esprit que ces systèmes d'équations sont résolus de manière indépendante pour leur partie transport [2].

2. Les schémas de flux numériques utilisés pour la partie convective de chaque système sont différents. Ceci est inévitable en raison de la nature mathématique différente des deux systèmes (cf. Chapitre 8).

– Les solveurs CHARME et SPIREE ne sont couplés que par l'intermédiaire des termes sources. La fraction volumique de la phase dispersée n'apparait pas dans les équations du fluide. Le volume occupé par la phase dispersée est donc supposé négligeable au sein d'un volume de contrôle. Par conséquent, il faut être vigilant à ce que cette hypothèse soit toujours respectée au cours des simulations sous peine de faire face à des difficultés numériques.

$$
\left\{
\begin{array}{l}
\left\{
\begin{array}{lllll}
\dfrac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho Y_i \boldsymbol{u}) &=& -\nabla\cdot\boldsymbol{J}_i + \overline{\dot{\omega}_i} & & 1 \le i \le N_g - 1 \\
\dfrac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho Y_i \boldsymbol{u}) &=& -\nabla\cdot\boldsymbol{J}_i + \overline{\dot{\omega}_i} + S_M^g & & i = N_g \\
\dfrac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho Y_i \boldsymbol{u}) &=& -\nabla\cdot\boldsymbol{J}_i + S_M^l & & i = N_t \\
\dfrac{\partial \rho \boldsymbol{u}}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho \boldsymbol{u}\otimes\boldsymbol{u} + P\boldsymbol{I}) &=& \nabla\cdot(\boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau}_c) + \rho\boldsymbol{g} + \boldsymbol{S_U} & & \\
\dfrac{\partial \rho e_t}{\partial t} + \nabla\cdot\Big[(\rho e_t + P)\boldsymbol{u}\Big] &=& \nabla\cdot\Big[(\boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau}_c)\cdot\boldsymbol{u}\Big] - \nabla\cdot\boldsymbol{J}_{e_t} + \rho\boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{u} + S_E & &
\end{array}
\right. \\
\\
\underbrace{\left\{
\begin{array}{lllll}
\dfrac{\partial n^{(k)}}{\partial t} + \nabla\cdot\left(n^{(k)}\boldsymbol{v}^{(k)}\right) &=& \widehat{\Gamma_1}^{(k)} + \mathcal{N}^{(k)} - \mathcal{N}^{(k-1)} + \mathcal{P}_N^{(k)} & & \\
\dfrac{\partial \alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}}{\partial t} + \nabla\cdot\left(\alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}\boldsymbol{v}^{(k)}\right) &=& \widehat{\Gamma_2}^{(k)} + n^{(k)}\left(\mathcal{E}^{(k)} - \mathcal{E}^{(k-1)} - \dot{m}_v^{(k)}\right) + \mathcal{P}_M^{(k)} & & \\
\dfrac{\partial \alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}\boldsymbol{v}^{(k)}}{\partial t} + \nabla\cdot\left(\alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}\boldsymbol{v}^{(k)}\otimes\boldsymbol{v}^{(k)}\right) &=& \widehat{\Gamma_3}^{(k)} + n^{(k)}\boldsymbol{F_{dr}}^{(k)} + \mathcal{P}_V^{(k)} + \alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}\boldsymbol{g} & & \\
& & + n^{(k)}\left(\boldsymbol{v}^{(k+1)}\mathcal{E}^{(k)} - \boldsymbol{v}^{(k)}\mathcal{E}^{(k-1)} - \boldsymbol{v}^{(k)}\dot{m}_v^{(k)}\right) & & \\
\dfrac{\partial \alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}e_T^{(k)}}{\partial t} + \nabla\cdot\left(\alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}e_T^{(k)}\boldsymbol{v}^{(k)}\right) &=& \widehat{\Gamma_4}^{(k)} + n^{(k)}\boldsymbol{F_{dr}}^{(k)}\cdot\boldsymbol{v}^{(k)} + \mathcal{P}_E^{(k)} & & \\
& & + \alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}\boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{v}^{(k)} + n^{(k)}\Phi_c^{(k)} & & \\
& & + n^{(k)}\left(e_T^{(k+1)}\mathcal{E}^{(k)} - e_T^{(k)}\mathcal{E}^{(k-1)} - e_T^{(k)}\dot{m}_v^{(k)}\right) & &
\end{array}
\right.}_{1 \le k \le N_s}
\end{array}
\right. \tag{6.11}
$$

Chapitre 7

Modélisation des termes sources

Nous avons établi aux Chapitre 5 et Chapitre 6 les systèmes d'équations retenus dans notre stratégie de couplage pour décrire le fluide et la phase dispersée. Un certain nombre de termes sources apparaissent dans ces équations, que ce soit des termes de couplage entre solveurs ou des termes décrivant les phénomènes internes au fluide ou à la phase dispersée. L'objectif de ce chapitre est de présenter les modèles, déjà existants, retenus pour exprimer certains de ces termes sources. Le modèle de couplage entre solveurs pour décrire l'atomisation primaire, ayant été développé dans cette étude, est lui présenté spécifiquement au Chapitre 10 de la Partie III.

Sommaire

7.1 Termes sources d'interaction entre la phase dispersée et le fluide 119
7.1.1 Modélisation du transfert de quantité de mouvement 119
7.1.2 Modélisation du transfert de masse et de chaleur par évaporation 120
7.2 Termes sources internes à la phase dispersée 122
7.2.1 Transfert entre sections par fragmentation 122
7.2.2 Flux entre sections liés à l'évaporation 126
7.3 Termes sources internes au fluide 127
7.3.1 Caractérisation du régime de combustion turbulente sur la configuration Mascotte 128
7.3.2 Modèles de Spalding et Magnussen 129
7.3.3 Modèle de relaxation vers l'équilibre 129

Avant d'entrer dans le détail des différents termes sources, il est à noter que l'on souhaite conserver dans ce chapitre les notations du système d'équations global (6.11) du Chapitre 6. Cependant, l'expression d'un terme source peut être fonction du contexte, par exemple selon qu'il s'agit d'un terme source exprimé à l'échelle d'une goutte isolée ou bien exprimé de manière moyenne sur la distribution en taille. Ainsi, les notations de ce chapitre sont choisies de la manière suivante :

- $\boldsymbol{u}$ et $\boldsymbol{v}^{(k)}$ désignent respectivement le vecteur vitesse du fluide et celui des gouttes de la section k de la phase dispersée. Dans le cas d'une modélisation à l'échelle d'une goutte, on utilisera également $\boldsymbol{v}$ pour représenter la vitesse de la goutte isolée.
- T désigne la température du fluide et $\theta^{(k)}$ celle des gouttes de la section k. Comme pour la vitesse, on utilisera θ pour représenter simplement la température d'une goutte isolée.
- dans le contexte sectionnel, les termes sources qui apparaissent dans les équations sont moyennés sur la variable taille. Cependant, les modèles à l'échelle de la goutte sont généralement exprimés en fonction du diamètre de la goutte. On utilisera alors la notation D pour désigner le diamètre d'une goutte isolée.
- les grandeurs thermodynamiques et les coefficients de transport du fluide ne seront pas indicés. On écrira par exemple ρ, c_p et μ pour désigner la masse volumique, la capacité calorifique et la viscosité du fluide, tandis que les mêmes grandeurs relatives à une goutte isolée seront notées ρ_d, $c_{p,d}$ et μ_d.

7.1 Termes sources d'interaction entre la phase dispersée et le fluide

Nous nous concentrons ici sur les termes sources de couplage "classiques", c'est-à-dire ceux qui impliquent un couplage entre la phase dispersée et la phase gazeuse du fluide. Les termes de couplage entre la phase dispersée et la phase liquide du fluide seront traités spécifiquement au Chapitre 10. Il est donc question ici des transferts de masse, de quantité de mouvement et d'énergie liés à l'évaporation et à la force de traînée. Autrement dit, il s'agit de formuler les termes $\boldsymbol{F_{dr}}^{(k)}$, $\dot{m}_v^{(k)}$ et $\Phi_c^{(k)}$, qui apparaissent dans les vecteurs termes sources $\boldsymbol{S}_{drag}^{(k)}$, $\boldsymbol{S}_{vap}^{(k)}$ et $\boldsymbol{S}_{\Phi}^{(k)}$ (cf. Chapitre 6).

7.1.1 Modélisation du transfert de quantité de mouvement

La force de traînée $\boldsymbol{F_{dr}}^{(k)}$ est responsable d'un transfert de quantité de mouvement entre la phase gazeuse du fluide et les gouttes de la section k. Si l'on note de manière générique $\boldsymbol{F_{dr}}$ le vecteur de la force de trainée s'exerçant sur une goutte isolée, alors celui-ci s'exprime :

$$\boldsymbol{F_{dr}} = \frac{1}{8}\pi D^2 \rho C_D \|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{v}\|(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{v}) \ . \tag{7.1}$$

Dans cette relation, C_D désigne le coefficient de traînée de la goutte. Pour une goutte sphérique, la corrélation généralement utilisée est la suivante :

$$C_D = \begin{cases} \dfrac{24}{\mathrm{Re}_p} & \text{si} \quad \mathrm{Re}_p < 1 \\ \dfrac{24}{\mathrm{Re}_p}\left(1+0,15\mathrm{Re}_p^{0,687}\right) & \text{si} \quad 1 \leq \mathrm{Re}_p \leq 1000 \\ 0,445 & \text{si} \quad 1000 < \mathrm{Re}_p \end{cases} \tag{7.2}$$

Pour $\mathrm{Re}_p < 1$, il s'agit du régime de Stokes. En dehors du régime de Stokes, les valeurs du coefficient de trainée ci-dessus sont issues de la corrélation de SCHILLER et NAUMANN [243]. De plus, il apparait le nombre de Reynolds particulaire Re_p, dont la définition est :

$$\mathrm{Re}_p = \frac{\rho D\|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{v}\|}{\mu} \ . \tag{7.3}$$

Ici, ρ et μ désignent respectivement la masse volumique et la viscosité dynamique de la phase gazeuse du fluide. La force de traînée peut également s'écrire en fonction du différentiel de vitesse et d'un temps de relaxation dynamique τ_u :

$$\boldsymbol{F_{dr}} = m_d \frac{\boldsymbol{u}-\boldsymbol{v}}{\tau_u} \ , \tag{7.4}$$

où $m_d = \rho_d \pi D^3/6$ est la masse d'une goutte. Par identification avec l'expression (7.1), le temps de relaxation dynamique s'écrit de manière générale :

$$\tau_u = \frac{4}{3}\frac{\rho_d}{C_D}\frac{D^2}{\mu}\frac{1}{\mathrm{Re}_p} . \tag{7.5}$$

Dans le cas particulier du régime de Stokes ($\mathrm{Re}_p < 1$), le coefficient de traînée vaut $C_D = 24/\mathrm{Re}_p$ et donc le temps de relaxation dynamique s'exprime :

$$\tau_u = \frac{\rho_d D^2}{18\mu} . \tag{7.6}$$

Cette expression n'est autre que la définition du temps de Stokes de la goutte. On obtient finalement la force de trainée moyenne $\boldsymbol{F_{dr}}^{(k)}$ en intégrant la relation (7.1) sur l'intervalle de taille de la section k.

7.1.2 Modélisation du transfert de masse et de chaleur par évaporation

Dans le cas général d'une goutte liquide entourée d'un mélange gazeux multi-espèces, l'évaporation et le chauffage de la goutte se produisent simultanément. Lorsque la température de la goutte est inférieure à celle du gaz, le flux de chauffage Φ_c est positif. La température de la goutte augmente alors, jusqu'à ce qu'elle se stabilise à sa température de saturation. Mais avant même que la goutte ait atteint la saturation, un transfert de masse par diffusion peut se produire. Les termes Φ_c et $\dot{m}_v$ sont donc reliés, autrement dit la description des transferts de masse et de chaleur par évaporation doit se faire de manière couplée.

Pour cela, le modèle développé par ABRAMZON et SIRIGNANO [5] est parmi les plus utilisés. Il fournit une formulation moyenne du débit massique d'évaporation et du flux de chauffage à la surface de la goutte. Ces formulations sont obtenues à partir de bilans de masse et d'enthalpie et d'un certain nombre d'hypothèses simplificatrices : symétrie sphérique, quasi-stationnarité du processus d'évaporation, équilibre dynamique avec le gaz, conduction infinie au sein de la goutte. Certaines de ces hypothèses peuvent cependant être relaxées a posteriori. Par exemple, des corrections sont ajoutées pour prendre en compte l'effet de la convection lorsque la goutte n'est pas en équilibre dynamique avec le gaz. De même, il est possible de relaxer l'hypothèse de conduction infinie en résolvant l'équation de la chaleur dans la goutte [1]. Enfin, une autre correction apportée par ABRAMZON et SIRIGNANO [5] consiste à prendre en compte l'effet du film de la vapeur évaporante autour de la goutte.

Le modèle d'ABRAMZON et SIRIGNANO [5] est disponible dans le solveur SPIREE. Bien qu'il s'agisse d'un modèle très classique, son application au cas de gouttes d'oxygène liquide à basse température s'évaporant dans un environnement gazeux à haute température n'est pas sans poser quelques difficultés numériques. Ainsi, des problèmes de robustesse peuvent parfois survenir lors des simulations. Lorsque les gouttes atteignent leur température de saturation, le modèle échoue à annuler strictement le flux de chauffage Φ_c. Celui-ci étant fortement couplé avec le débit d'évaporation $\dot{m}_v$, des oscillations peuvent apparaitre et s'amplifier. Cette constatation a justifié qu'une analyse des difficultés et de leur origine soit menée au cours de cette étude. Ainsi certaines modifications ont pu être apportées au code pour en améliorer la robustesse.

Sans ces corrections, les simulations finales de la configuration Mascotte présentées au Chapitre 11 n'auraient pas pu être menées à bien. C'est pourquoi nous joignons en Annexe E de ce manuscrit le rapport qui a été rédigé à ce sujet. Le lecteur prendra garde au fait que les notations de l'Annexe E ne sont pas forcément consistantes avec le corps du manuscrit. Par ailleurs, outre l'analyse des difficultés de robustesse, l'Annexe E contient également une description détaillée de l'établissement du modèle et des hypothèses sous-jacentes. C'est pourquoi nous nous contentons de donner ici les équations du modèle final, utiles au calcul des termes sources $\dot{m}_v$ et Φ_c (à l'échelle d'une goutte).

Équations du modèle général

Le modèle général d'évaporation est défini par les relations (7.7) à (7.16) ci-dessous. Dans ces relations, Sh et Nu désignent les nombres adimensionnels de Sherwood et de Nusselt. Ils sont exprimés à partir de corrélations, fonctions du nombre de Reynolds particulaire Re_p, du nombre de Prandtl moyen de la phase gazeuse Pr, et du nombre de Schmidt de l'espèce évaporante Sc_A. Ces nombres sont introduits pour tenir compte des effets convectifs autour de la goutte. Les propriétés de la phase gazeuse qui interviennent dans le calcul de ces nombres sont évaluées dans un état intermédiaire entre la surface de la goutte et l'infini (c'est-à-dire dans le mélange gazeux loin de la goutte). Ainsi, la notation $\widetilde{\bullet}$ représente une valeur moyenne calculée dans cet état intermédiaire entre la surface et l'infini. De plus, B_M est le nombre de Spalding massique et B_T est le nombre de Spalding thermique. Les termes Sh^* et Nu^* désignent des nombres de Sherwood et de Nusselt corrigés, de manière à prendre en compte l'effet

1. Cette fonctionnalité est disponible dans le solveur SPIREE, il s'agit du modèle dit à ***n couches*** (PRUD'HOMME et al. [220]). Cependant, nous n'utiliserons pas cette possibilité dans nos travaux.

du film de vapeur de l'espèce évaporante autour de la goutte. L'indice A désigne l'espèce évaporante parmi les espèces du mélange gazeux. Dans notre cas, il s'agit de l'espèce oxygène gazeux. Les indices s et ∞ indiquent des grandeurs respectivement évaluées à la surface de la goutte et à l'infini (cf. Figure 7.1). Ainsi, T_∞ est la température du gaz à l'infini, qui s'identifie ici à la température du fluide CHARME dans la maille de calcul, que l'on a notée T (voir le début du chapitre). De même, T_s est la température de surface de la goutte. Puisque nous supposons une conduction infinie, T_s n'est autre que l'unique température uniforme de la goutte, que nous avons notée θ. Enfin, l_v désigne la chaleur latente de vaporisation.

$$\mathrm{Sh} = 2 + 0.6\mathrm{Re}_p^{1/2}\mathrm{Sc}_A^{1/3} \tag{7.7}$$

$$\mathrm{Nu} = 2 + 0.6\mathrm{Re}_p^{1/2}\mathrm{Pr}^{1/3} \tag{7.8}$$

$$\mathrm{B}_M = \frac{Y_{As} - Y_{A\infty}}{1 - Y_{As}} \tag{7.9}$$

$$\mathrm{B}_T = \frac{\widetilde{c_{p,A}}\,(T_\infty - T_s)}{\dfrac{\Phi_c}{\dot{m}_v} + l_v(T_s)} \tag{7.10}$$

$$F(\mathrm{B}) = (1+\mathrm{B})^{0.7}\,\frac{\ln(1+\mathrm{B})}{\mathrm{B}} \tag{7.11}$$

$$\mathrm{Sh}^* = 2 + \frac{\mathrm{Sh} - 2}{F(\mathrm{B}_M)} \tag{7.12}$$

$$\mathrm{Nu}^* = 2 + \frac{\mathrm{Nu} - 2}{F(\mathrm{B}_T)} \tag{7.13}$$

$$\dot{m}_v = \pi D \widetilde{\rho\mathcal{D}_A}\mathrm{Sh}^* \ln(1+\mathrm{B}_M) \tag{7.14}$$

$$\dot{m}_v = \pi D \frac{\widetilde{\lambda}}{\widetilde{c_{p,A}}}\mathrm{Nu}^* \ln(1+\mathrm{B}_T) \tag{7.15}$$

$$\Phi_c = \frac{\dot{m}_v}{\mathrm{B}_T}\widetilde{c_{p,A}}\,(T_\infty - T_s) - \dot{m}_v\, l_v(T_s) \tag{7.16}$$

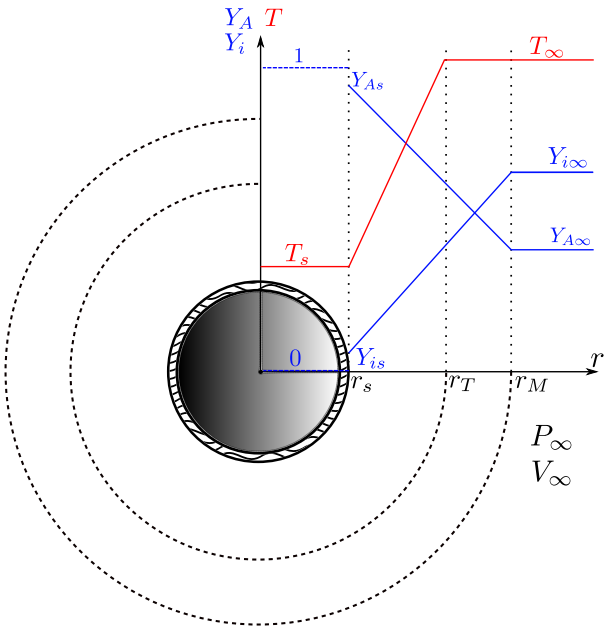


FIGURE 7.1 – ***Notations et hypothèses du modèle d'évaporation.***

Algorithme de résolution

La détermination des termes $\dot{m}_v$ et Φ_c passe donc par la résolution des équations (7.7) à (7.16). En pratique, cela doit être réalisé dans un ordre précis, selon l'algorithme suivant (cf. Annexe E pour plus de détails) :

1. calcul de Y_{As}, la fraction massique de l'espèce évaporante à la surface de la goutte. Le calcul préalable de la pression de vapeur saturante est nécessaire.
2. calcul du nombre de Spalding de masse B_M.
3. calcul du débit d'évaporation par la formule (7.14) le reliant à B_M.
4. calcul du nombre de Spalding thermique B_T en utilisant l'égalité des relations (7.14) et (7.15). Il faut ici recourir à un procédé itératif, les facteurs de films étant fonctions des nombres de Spalding.
5. calcul du flux de chauffage Φ_c par la relation (7.16).

Cet algorithme permet d'obtenir les expressions du débit massique $\dot{m}_v$ et du flux de chauffage Φ_c ***à l'échelle d'une goutte***. Dans une approche multi-classes (cf. Chapitre 3), il suffirait de multiplier ces termes par la densité en nombre de gouttes pour obtenir les termes sources à intégrer dans les équations de conservation. En revanche, dans les approches sectionnelles, obtenir $\dot{m}_v^{(k)}$ et $\Phi_c^{(k)}$ n'est pas aussi simple. En effet, chacune des relations qui intervient dans le modèle et qui a une dépendance en la variable taille doit être intégrée sur l'intervalle de la section k. En pratique, quelques simplifications peuvent être faites pour éviter de trop nombreux calculs d'intégrales numériques.

7.2 Termes sources internes à la phase dispersée

Les termes sources internes à la phase dispersée sont ceux qui apparaissent dans les vecteurs termes sources $\boldsymbol{S}_\Gamma^{(k)}$ et $\boldsymbol{S}_{sec}^{(k)}$ définis au Chapitre 6. Il s'agit respectivement de termes de fragmentation et des flux entre sections liés à l'évaporation.

7.2.1 Transfert entre sections par fragmentation

Considérons une goutte isolée, appelée ***goutte mère***, en déséquilibre dynamique avec la phase gazeuse. Un modèle de fragmentation doit être capable de prédire si cette goutte mère va se fragmenter, quelle est la durée du processus de fragmentation, et quelles sont les propriétés des ***gouttes filles*** résultantes en termes de taille et de vitesse. Le modèle que nous utilisons a été développé initialement par PILCH et ERDMAN [213]. Il a été étendu ensuite par POUGATCH et al. [216] puis POUGATCH et al. [217] pour ajouter l'effet de la turbulence à celui de la force de traînée. On utilise également la corrélation de WERT [299] pour estimer la taille moyenne des fragments (gouttes filles), ainsi que les travaux de DUFOUR [77] qui permettent de formuler l'opérateur de fragmentation en sectionnel.

7.2.1.1 Modèle à l'échelle d'une goutte

On considère une goutte de diamètre D, de vecteur vitesse $\boldsymbol{v}$ et de masse volumique ρ_d, portée par une phase gazeuse de densité ρ, de viscosité μ et de vecteur vitesse $\boldsymbol{u}$. Le coefficient de tension de surface à l'interface liquide-gaz est noté σ. D'après POUGATCH et al. [217], la fréquence de rupture de cette goutte, notée f_{br} et qui s'exprime en s^{-1}, est donnée par la relation suivante :

$$\boxed{f_{br} = \max\left\{\min_{i=D,T}\left\{\frac{\left(D - D_{st}^i\right)^3 - 1}{\tau_{br}^i}, \frac{100}{\tau_{br}^i}\right\}, \frac{1}{\tau_{br}^i}\right\}.} \tag{7.17}$$

Dans cette relation, l'exposant i désigne un terme lié à la traînée ($i = D$) ou à la turbulence ($i = T$). Le terme D_{st}^i représente le plus petit diamètre stable, tel que

$$D_{st}^i = \frac{\mathrm{We}_{cr}^i \sigma}{\rho \left(\Delta U^i\right)^2}, \tag{7.18}$$

où We_{cr}^i est un nombre de Weber critique. Dans le cas de la rupture induite par la traînée ($i = D$), son expression est

$$\mathrm{We}_{cr}^D = \begin{cases} 25 & \text{si} \quad \mathrm{Re}_p < 200 \\ 55\, f\left(\mathrm{Re}_p\right) & \text{si} \quad 200 \leq \mathrm{Re}_p < 2000 \\ 5,48 & \text{si} \quad \mathrm{Re}_p \geq 2000 \end{cases}. \tag{7.19}$$

Le nombre de Reynolds particulaire Re_p est exprimé par la relation (7.3) et la fonction $f\left(\mathrm{Re}_p\right)$ s'écrit

$$f\left(\mathrm{Re}_p\right) = \frac{24}{\mathrm{Re}_p} + \frac{20,1807}{\mathrm{Re}_p^{0,615}} - \frac{16}{\mathrm{Re}_p^{0,667}}. \tag{7.20}$$

Le nombre de Weber critique relatif à la turbulence ($i = T$) est donné par

$$\mathrm{We}_{cr}^T = \left(\frac{\rho}{\rho_d}\right)^{2/3} \left(\frac{\rho_d - \rho}{\rho_d}\right) \mathrm{We}_{cr}^D. \tag{7.21}$$

Le différentiel de vitesse ΔU^D (lié à la traînée) s'exprime simplement

$$\Delta U^D = \|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v}\| \,. \tag{7.22}$$

Le différentiel de vitesse ΔU^T (lié à la turbulence) est lui modélisé comme une fonction du diamètre de la goutte et du taux de dissipation turbulente ϵ de la phase gazeuse :

$$\Delta U^T = (\epsilon D)^{1/3} \,. \tag{7.23}$$

Si l'on connait le taux de dissipation turbulente ϵ, les expressions des diamètres critiques stables D^D_{st} et D^T_{st} sont fermées. Pour fermer la relation (7.17), il reste à fournir les expressions des temps de rupture τ^D_{br} et τ^T_{br}, respectivement induits par la traînée et par la turbulence.

Temps de rupture induit par la turbulence

Le temps de rupture induit par la turbulence s'exprime

$$\tau^T_{br} = \left(\frac{D^2}{\epsilon_d}\right)^{1/3} \,, \tag{7.24}$$

où ϵ_d est le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente de la phase dispersée. D'après POUGATCH et al. [217], ce terme est relié à la dissipation turbulente de la phase gazeuse ϵ par la relation

$$\epsilon_d = C_t^2 \epsilon \,, \tag{7.25}$$

où C_t est un coefficient de réponse de la turbulence du liquide. Dans le cas d'une phase dispersée liquide et d'une phase porteuse gazeuse, ces auteurs donnent d'après VIOLLET et SIMONIN [293] :

$$C_t = \left(\frac{\tau^T_{cd}}{\tau^T_{cd} + \tau^D_{cd}}\right)^{1/2} \,. \tag{7.26}$$

Dans cette relation, τ^D_{cd} est un temps caractéristique d'entrainement des particules, lié à la force de traînée, et dont l'expression est

$$\tau^D_{cd} = \frac{4}{3}\frac{\rho_d}{\rho}\frac{D}{C_D\|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v}\|} \,, \tag{7.27}$$

C_D étant le coefficient de traînée de la goutte, dont une corrélation fonction du nombre de Reynolds particulaire a été donnée en (7.2). De plus, τ^T_{cd} est un temps d'interaction des gouttes avec les tourbillons, qui s'exprime comme

$$\tau^T_{cd} = \frac{3}{2}\frac{k}{\epsilon}\frac{C_\mu}{\sqrt{1 + C_\beta \xi^2}} \,, \tag{7.28}$$

où k désigne l'énergie cinétique turbulente de la phase gazeuse, C_μ est la constante classique du modèle $k - \epsilon$ dont la valeur est généralement prise égale à 0,09, et enfin :

$$\begin{cases} \xi &= \dfrac{\|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v}\|}{\sqrt{(2/3)k}} \\ C_\beta &= 1,8 - 1,35\left[\dfrac{\boldsymbol{v}\cdot(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v})}{\|\boldsymbol{v}\|\,\|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v}\|}\right]^2 \end{cases} \,. \tag{7.29}$$

Il faut noter que les termes de fragmentation induits par la turbulence ont été pensés pour être utilisés dans un cadre RANS (manifestement avec le modèle $k - \epsilon$). Dans un cadre LES ou MILES, il est possible d'estimer l'énergie cinétique turbulente de sous-maille k_{SGS} et sa dissipation ϵ_{SGS}. Ces grandeurs sont alors exprimées par les relations (5.77) et (5.78) du Chapitre 5, où les constantes de proportionnalité peuvent être ajustées. Cependant, il faut être assez vigilant sur ce point. En effet, en LES, l'énergie cinétique turbulente de sous-maille ne représente qu'une partie de l'énergie cinétique turbulente totale, l'autre partie étant résolue. Plus la LES est résolue, moins l'énergie cinétique turbulente de sous-maille représente une part importante de l'énergie cinétique turbulente totale. Évaluer la fragmentation secondaire turbulente à partir de la seule énergie cinétique turbulente de sous-maille n'est donc pas idéal. En toute rigueur, il faudrait connaitre l'énergie cinétique turbulente totale, en calculant sa fraction résolue [2].

2. L'énergie cinétique turbulente résolue s'obtient en calculant la différence entre le champ de vitesse résolu et le champ de vitesse moyenné dans le temps.

Temps de rupture induit par la traînée

L'expression du temps de rupture induit par la traînée fait la distinction entre plusieurs régimes de rupture, identifiés par PILCH et ERDMAN [213], et représentés sur la Figure 7.2 :

$$\frac{\tau_{br}^{D}}{\tau^{*}} = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad \text{We} \leq 12 \\ 6\,(\text{We}-12)^{-0,25} & \text{si} \quad 12 < \text{We} \leq 18 \\ 2,45\,(\text{We}-12)^{0,25} & \text{si} \quad 18 < \text{We} \leq 45 \\ 14,1\,(\text{We}-12)^{-0,25} & \text{si} \quad 45 < \text{We} \leq 350 \\ 0,766\,(\text{We}-12)^{0,25} & \text{si} \quad 350 < \text{We} \leq 2670 \\ 5,5 & \text{si} \quad 2670 < \text{We} \end{cases} \tag{7.30}$$

Une échelle de temps caractéristique τ^{*} a été utilisée pour adimensionner la corrélation. Son expression est la suivante :

$$\tau^{*} = \frac{D}{\|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{v}\|}\left(\frac{\rho_d}{\rho}\right)^{1/2} . \tag{7.31}$$

Le nombre de Weber local We a également été introduit, il s'exprime ici :

$$\text{We} = \frac{\rho\|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{v}\|^2 D}{\sigma} . \tag{7.32}$$

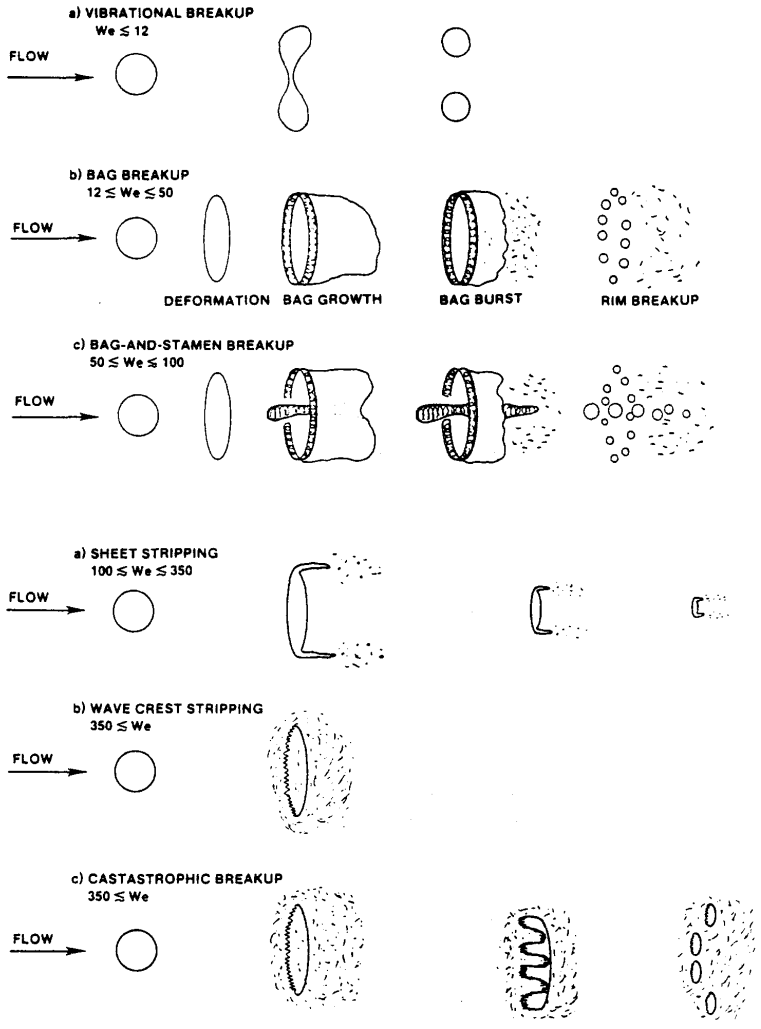


FIGURE 7.2 – ***Régimes de fragmentation secondaire induite par la traînée d'après* PILCH *et* ERDMAN *[213].***

Il est à noter que la corrélation (7.30) est valable pour des gouttes peu visqueuses, c'est-à-dire typiquement pour un nombre d'Ohnesorge inférieur à 0,1 (voir la définition* (2.7) du nombre d'Ohnesorge au Chapitre 2). Pour

des nombres d'Ohnesorge plus élevés, la corrélation peut être corrigée par l'introduction d'une fonction du nombre d'Ohnesorge (PILCH et ERDMAN [213]). Nous ne tenons pas compte de ces corrections ici, dans la mesure où les cas que nous avons à traiter présentent des nombres d'Ohnesorge très faibles (cf. Tableau 1.2).

Taille des fragments

Il existe assez peu d'études concernant la distribution en taille des gouttes issues de fragmentation. Cela s'explique probablement par les difficultés à visualiser expérimentalement des processus qui sont très rapides, et qui se déroulent dans des conditions d'écoulement présentant de forts nombres de Weber et de Reynolds (DUFOUR [77], POUGATCH et al. [217]). L'approche la plus simple consiste à supposer que toutes les gouttes filles issues de la fragmentation d'une goutte mère de diamètre D ont le même diamètre D_f. Dans cette approche, deux voies sont possibles :

(i) le nombre de gouttes filles est postulé. Dans ce cas, le diamètre D_f est directement obtenu par conservation de la masse. Cette approche n'est acceptable que dans des cas bien précis, où le régime de fragmentation est clairement identifié.

(ii) le diamètre D_f est modélisé, généralement en fonction de la fréquence de fragmentation.

La deuxième voie est celle suivie par WERT [299], qui exprime le rapport entre le diamètre moyen [3] D_f des gouttes filles et le diamètre D de la goutte mère comme

$$\frac{D_f}{D} = C_l \mathrm{We}^{-1/3} \left(\frac{\tau_{br}^D - \tau_i}{\tau^*} \right)^{2/3} . \tag{7.33}$$

Dans cette expression, τ_{br}^D est le temps de rupture induit par la traînée et défini par la corrélation (7.30) de PILCH et ERDMAN [213] [4]. De plus, τ_i représente le temps nécessaire pour initier la rupture (antérieur à la fragmentation en elle-même). La modélisation de ce terme est également fournie par PILCH et ERDMAN [213] :

$$\frac{\tau_i}{\tau^*} = 1,9\,(\mathrm{We} - 12)^{-0,25} . \tag{7.34}$$

7.2.1.2 Formulation de l'opérateur sectionnel

A ce stade, il reste à formuler l'opérateur de fragmentation Γ qui apparait dans l'équation cinétique (cf. (3.43) au Chapitre 3 ou (A.1) en Annexe A), à partir des modèles à l'échelle de la goutte que nous venons de voir. Ce travail a été réalisé dans la thèse de DUFOUR [77]. Une fois l'opérateur Γ défini, il est possible de calculer les termes moyens $\widehat{\Gamma_1}^{(k)}$, $\widehat{\Gamma_2}^{(k)}$, $\widehat{\Gamma_3}^{(k)}$ et $\widehat{\Gamma_4}^{(k)}$, qui apparaissent dans les équations de conservation de chaque section. Nous allons reprendre ici les notations utilisées pour écrire les équations de la phase dispersée dans l'approche sectionnelle (cf. Chapitre 3). On rappelle ainsi que $f(t, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}, s, \theta)$ désigne la fonction densité de probabilité en nombre de gouttes au niveau cinétique, et que différents choix sont possibles pour la variable taille s, notamment le diamètre ou la surface des gouttes. La fréquence de fragmentation f_{br}, modélisée par la relation (7.17), est également a priori une fonction de $(t, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}, s, \theta)$. En omettant l'écriture des dépendances en t, $\boldsymbol{x}$ et θ, DUFOUR [77] propose alors la forme suivante pour l'opérateur de fragmentation :

$$\boxed{\Gamma(\boldsymbol{v}, s) = \int_{\Omega_s} f_{br}(\boldsymbol{v}^*, s^*)\, f(\boldsymbol{v}^*, s^*)\, \mathcal{H}(s, \boldsymbol{v}, s^*, \boldsymbol{v}^*)\, \mathrm{d}s^*\, \mathrm{d}\boldsymbol{v}^* \;-\; f_{br}(\boldsymbol{v}, s)\, f(\boldsymbol{v}, s) .} \tag{7.35}$$

Dans cette relation, $\mathcal{H}$ est une fonction telle que la quantité $\mathcal{H}(s, \boldsymbol{v}, s^*, \boldsymbol{v}^*)\, \mathrm{d}s\, \mathrm{d}\boldsymbol{v}$ représente le nombre probable de gouttes ayant une taille comprise entre s et $s + \mathrm{d}s$, une vitesse comprise entre $\boldsymbol{v}$ et $\boldsymbol{v} + \mathrm{d}\boldsymbol{v}$, et qui sont issues de la fragmentation d'une goutte mère de taille s^* et de vitesse $\boldsymbol{v}^*$. De plus, l'espace d'intégration est $\Omega_s =]s, +\infty[\times \mathrm{R}^3$. L'opérateur Γ s'interprète donc comme la résultante de deux effets :

- une augmentation du nombre de gouttes de taille s, en raison de la fragmentation possible de toute goutte mère de taille $s^* > s$.
- une diminution du nombre de gouttes de taille s, en raison de leur propre fragmentation.

3. Il s'agit d'un diamètre moyen de Sauter ou D_{32}.

4. A noter que WERT [299] utilise la corrélation de PILCH et ERDMAN [213] mais en étendant la condition $45 < \mathrm{We} \leq 350$ (régime de "sheet stripping" d'après la Figure 7.2) au cas $\mathrm{We} > 350$. Il n'utilise donc pas l'expression spécifique au régime de "catastrophic breakup".

Ensuite, DUFOUR [77] propose de découpler les aspects de distribution en taille et en vitesse dans la fonction $\mathcal{H}$ en écrivant

$$\mathcal{H}(s, \boldsymbol{v}, s^*, \boldsymbol{v}^*) = g_v(s, \boldsymbol{v}, s^*, \boldsymbol{v}^*)\, g_s(s, s^*, \boldsymbol{v}^*) \ , \tag{7.36}$$

où g_v et g_s sont les distributions en vitesse et en taille des fragments issus d'une goutte mère de taille s^* et de vitesse $\boldsymbol{v}^*$. En effet, la question de la vitesse des fragments n'est pas triviale. Puisque la fragmentation est un processus qui se déroule en un temps fini, et puisque les gouttes filles obtenues en fin de fragmentation ont une taille inférieure à celle de la goutte mère, la force de traînée appliquée aux gouttes en cours de fragmentation modifie leur vitesse initiale. DUFOUR [77] modélise ainsi la vitesse des fragments en utilisant la corrélation de HSIANG et FAETH [141]. Il suppose par ailleurs que tous les fragments d'une taille donnée ont la même vitesse. Cependant, la modélisation de HSIANG et FAETH [141] n'est pas intégrée au solveur SPIREE à l'heure actuelle, et la vitesse des fragments est supposée être celle de la goutte mère. Nous avons donc :

$$g_v(s, \boldsymbol{v}, s^*, \boldsymbol{v}^*) = g_v(\boldsymbol{v}^*) = \delta(\boldsymbol{v} - \boldsymbol{v}^*) \ . \tag{7.37}$$

Enfin, il reste à postuler la forme de la distribution en taille des fragments g_s. Nous avons vu précédemment qu'il existe des modèles qui prédisent un unique diamètre moyen de fragments. Il nous faut donc ici aller plus loin, en postulant une distribution et non un unique diamètre moyen. Pour cela, DUFOUR [77] note qu'il existe plusieurs formes possibles issues de la littérature et choisit finalement l'approche de O'ROURKE et AMSDEN [206], dont il modifie légèrement l'expression. Il obtient l'expression suivante pour la distribution en taille des gouttes filles :

$$g_s(s, s^*, \boldsymbol{v}^*) = \phi_1(s, s^*, \boldsymbol{v}^*) \exp\left[-\phi_2(s, s^*, \boldsymbol{v}^*)\right] \ . \tag{7.38}$$

L'expression des fonctions $\phi_1(s, s^*, \boldsymbol{v}^*)$ et $\phi_2(s, s^*, \boldsymbol{v}^*)$ dépend du choix de la variable taille (surface ou rayon). Pour fermer ces deux fonctions, DUFOUR [77] utilise le modèle de WERT [299] écrit en (7.33), qui prédit le diamètre moyen de Sauter des fragments.

Pour conclure, soulignons que la problématique de l'intégration numérique des termes sources de fragmentation n'est pas abordée ici et ne sera pas abordée non plus au Chapitre 8. Ces aspects sont traités dans la thèse de DUFOUR [77], notamment en ce qui concerne les procédures de calcul d'intégrales numériques et les critères de stabilité.

7.2.2 Flux entre sections liés à l'évaporation

Nous avons vu au Chapitre 3 et dans l'Annexe B que lorsque l'on considère une phase dispersée évaporante décrite par une méthode sectionnelle, des termes de flux entre sections apparaissent. Ces termes sont regroupés dans le vecteur terme source $\boldsymbol{S}_{sec}^{(k)}$ défini au Chapitre 6. Ils traduisent le déplacement de la distribution dans l'espace des tailles à mesure que l'évaporation se produit. Leur expression fait intervenir l'opérateur de variation de taille des gouttes $\mathcal{K}$ qui apparait dans l'équation cinétique, et est donc directement reliée à la modélisation du débit d'évaporation à l'échelle de la goutte (cf. § 7.1.2). Ces termes ne nécessitent donc aucune fermeture nouvelle en ce qui concerne la ***modélisation physique à l'échelle de la goutte***. En revanche, la question se pose de leur ***intégration numérique*** dans le cadre de la méthode sectionnelle. En effet, il est nécessaire de construire un véritable schéma numérique d'intégration pour décrire les flux dans l'espace des tailles. Comme dans une méthode de volumes finis classique, ce schéma de flux doit respecter des critères de stabilité. Il doit également préserver la réalisabilité des moments en taille, ce qui est loin d'être évident dans le cadre d'une méthode sectionnelle à deux moments. Le schéma numérique d'intégration que nous utilisons dans cette étude a été développé très récemment dans le solveur SPIREE. Il s'agit du schéma SRST (Simultaneous Reactive Source Term scheme), développé dans le cadre de la thèse de SIBRA [251] et également présenté dans SIBRA et al. [252]. Nous en donnons un rapide descriptif ci-dessous.

Principe du schéma SRST

Le schéma SRST a été développé par SIBRA [251] dans le cadre de la méthode sectionnelle avec reconstruction affine associée à des techniques de splitting d'opérateurs, c'est-à-dire où l'intégration temporelle de la partie transport des équations est découplée de celle des termes sources (cf. Chapitre 8). Ce schéma procède à une intégration simultanée des termes sources de couplage "classiques" avec la phase gazeuse (évaporation, flux de chaleur, force de traînée) et des termes de flux entre section.

Pour simplifier, considérons une phase dispersée purement évaporante et donc un transfert des sections supérieures vers les sections inférieures. Le principe du schéma SRST, également illustré par la Figure 7.3, est globalement le suivant :

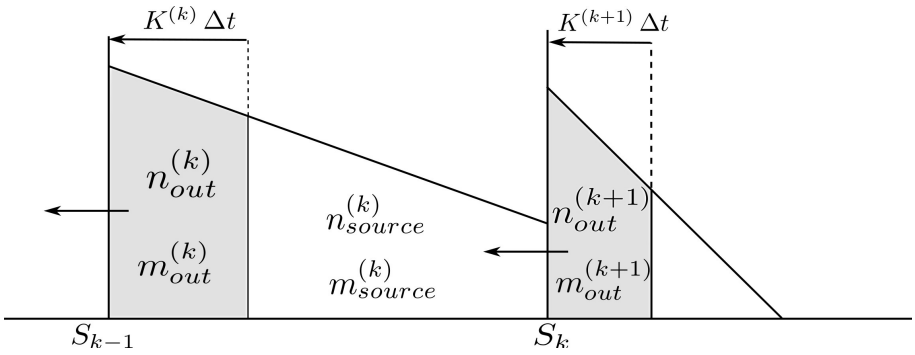


FIGURE 7.3 – ***Principe du schéma SRST en sectionnel avec reconstruction affine d'après* SIBRA *[251].***

– On introduit $K^{(k)}$ le taux de variation moyen de la taille sur la section k, défini comme (voir les notations et définitions de l'Annexe B) :

$$K^{(k)} = \frac{\displaystyle\int_{I_s^{(k)}} \overline{\mathcal{K}}(s)\ \phi_s^{(k)}(s)\,\mathrm{d}s}{\displaystyle\int_{I_s^{(k)}} \phi_s^{(k)}(s)\,\mathrm{d}s}\ . \tag{7.39}$$

Or, si $\dot{m}_v(s)$ désigne le débit massique par évaporation à la surface d'une goutte de taille s (grandeur exprimée en kg/s et fournie par les modèles classique du paragraphe § 7.1.2), l'Annexe B a permis d'établir que l'on avait la relation suivante :

$$\dot{m}_v(s) = -\rho_0\,\tau'(s)\,\overline{\mathcal{K}}(s)\ . \tag{7.40}$$

Ainsi, le taux de variation moyen de la taille sur la section s'exprime également :

$$K^{(k)} = -\frac{1}{\rho_0}\frac{\displaystyle\int_{I_s^{(k)}} \frac{\dot{m}_v(s)}{\tau'(s)}\,\phi_s^{(k)}(s)\,\mathrm{d}s}{\displaystyle\int_{I_s^{(k)}} \phi_s^{(k)}(s)\,\mathrm{d}s}\ . \tag{7.41}$$

On fait ensuite l'hypothèse que $K^{(k)}$ ne varie pas au cours du pas de temps d'intégration Δt.

– Chaque section $I_s^{(k)} = [s_{k-1}, s_k[$ est découpée en deux sous-intervalles : un intervalle inférieur ***out*** tel que $I_{out}^{(k)} = \left[s_{k-1}, s_{k-1} + K^{(k)}\Delta t\right[$, et un intervalle ***source*** tel que $I_{source}^{(k)} = \left[s_{k-1} + K^{(k)}\Delta t, s_k\right[$. L'intervalle ***out*** contient la masse (et les quantités conservées associées) transférées à la section inférieure, tandis que l'intervalle ***source*** contient la masse restant dans la section courante.

– La taille respective de ces deux intervalles est fonction du taux de variation de la taille des gouttes dans la section et du pas de temps. Évidemment, il ne faut pas que $s_{k-1} + K^{(k)}\Delta t$ soit supérieur à s_k. Cette condition fixe un critère de stabilité de type "CFL évaporant", dont SIBRA [251] démontre qu'il constitue une condition suffisante pour que le schéma préserve la réalisabilité des moments dans la section. En d'autres termes, la masse et la densité en nombre calculées au temps t^{n+1} conduisent bien à une taille s restant comprise entre les bornes de la section.

– L'intégration temporelle est explicite et les démonstrations de SIBRA [251] sont faites avec un schéma à une étape. Cependant, des schémas explicites à plusieurs étapes peuvent être utilisés. Les schémas de la famille Runge-Kutta TVD (RK2-TVD, RK3-TVD) sont des combinaisons linéaires de schémas à une étape, et donc à ce titre ils préservent globalement la réalisabilité.

Nous renvoyons le lecteur intéressé aux travaux de SIBRA [251] et SIBRA et al. [252] pour une description complète et une analyse de la méthode.

7.3 Termes sources internes au fluide

Les termes sources internes au fluide sont liés au champ gravitationnel et aux réactions chimiques. Ils sont regroupés dans les vecteurs $\boldsymbol{S_G}$ et $\boldsymbol{S_\omega}$ définis par la relation (5.28) du Chapitre 5 (équations instantanées), ou dans les vecteurs $\widetilde{\boldsymbol{S_G}}$ et $\widetilde{\boldsymbol{S_\omega}}$ définis par la relation (5.64) du Chapitre 5 (équations filtrées). Les termes de gravité ne

nécessitent aucune modélisation. En revanche, les termes chimiques concernant les espèces gazeuses du fluide impliquées dans la combustion hydrogène-oxygène doivent être modélisés.

Nous avons expliqué en § 6.3 que nous adopterions une approche implicite de la turbulence pour les simulations numériques. Par conséquent, on peut raisonner avec les équations et les variables instantanées, sauf en ce qui concerne les termes sources chimiques. Ainsi, les termes sources chimiques restent les termes filtrés $\overline{\dot{\omega}_i}$, dont la modélisation doit rendre compte de l'***interaction chimie-turbulence*** (ICT). Or, la description de l'ICT n'est pas triviale en raison de la forte non linéarité des taux de réaction chimique. Supposons que f_ω soit la fonction reliant le taux de réaction instantané $\dot{\omega}_i$ aux variables P, T et Y_i :

$$\dot{\omega}_i = f_\omega \left(P, T, Y_i\right) . \tag{7.42}$$

En raison de la forte non-linéarité de f_ω, il n'est pas possible d'évaluer le taux de réaction filtré à partir de f_ω et des variables filtrées, ce que l'on peut exprimer sous la forme

$$\overline{\dot{\omega}_i} \neq f_\omega \left(\widetilde{P}, \widetilde{T}, \widetilde{Y_i}\right) . \tag{7.43}$$

Exprimé autrement, cela signifie qu'il existe une fonction $g_\omega \neq f_\omega$ telle que :

$$\overline{\dot{\omega}_i} \approx g_\omega \left(\widetilde{P}, \widetilde{T}, \widetilde{Y_i}\right) . \tag{7.44}$$

Le rôle des ***modèles de combustion turbulente*** consiste précisément à proposer la meilleure formulation de g_ω. Un nombre assez important de modèles de combustion turbulente a été développé dans la littérature (VEYNANTE et VERVISCH [279], BORGHI [25]). Cela s'explique par le fait qu'un modèle donné n'est généralement bien adapté que pour une certaine catégorie d'écoulement réactif. Sa validité dépend du type de flamme (flamme de diffusion ou flamme de prémélange), de la vitesse des processus chimiques, du nombre de Reynolds (intensité de la turbulence de l'écoulement), ou encore du nombre de Mach (écoulement quasi-incompressible, compressible subsonique ou supersonique).

7.3.1 Caractérisation du régime de combustion turbulente sur la configuration Mascotte

Nous souhaitons ici choisir un modèle de combustion turbulente adapté à la configuration du banc Mascotte présentée au Chapitre 1. Pour cela, il faut d'abord déterminer le régime de combustion turbulente. Nous avons vu au Chapitre 1 que l'oxygène en sortie d'un injecteur cryotechnique prend la forme d'un jet liquide, puis est atomisé par un écoulement co-axial d'hydrogène gazeux injecté à très haute vitesse (voir également le schéma du Chapitre 4). Lorsque les gouttes d'oxygène liquide s'évaporent, l'oxygène gazeux réagit ainsi avec l'hydrogène sous la forme d'une ***flamme turbulente de diffusion***, et la combustion se déroule en écoulement subsonique. Il reste à évaluer la rapidité des processus chimiques. Pour cela, on introduit généralement le nombre adimensionnel de Damköhler (turbulent), noté Da, qui compare un temps chimique τ_c à un temps caractéristique de la turbulence τ_t :

$$\mathrm{Da} = \frac{\tau_t}{\tau_c} . \tag{7.45}$$

Lorsque $\mathrm{Da} \ll 1$, les processus chimiques élémentaires se déroulent à une vitesse très inférieure à la vitesse de mise en contact des réactifs par le mélange turbulent. Dans ce cas, il est nécessaire de prendre en compte les vitesses respectives de chaque processus élémentaire, c'est-à-dire recourir à une description de la ***cinétique chimique***. Une telle approche est généralement lourde, surtout lorsque les processus chimiques impliquent un grand nombre de réactions et d'espèces intermédiaires (produits de dissociation par exemple).

Dans le cas contraire $\mathrm{Da} \gg 1$, les processus chimiques sont beaucoup plus rapides que le processus de mise en contact des réactifs. En d'autres termes, les produits de la réaction sont formés quasi instantanément dès lors que les réactifs sont en contact. On parle de ***chimie infiniment rapide***. Dans ce cas, même s'il existe potentiellement un grand nombre de réactions et d'espèces intermédiaires, elles sont tellement rapides qu'il est possible de les négliger. Les taux de réaction des espèces chimiques sont alors uniquement pilotés par le temps de mise en contact des réactifs, qui est généralement un temps de mélange turbulent. De plus la réaction peut être représentée par un ***unique processus chimique irréversible***, écrit sous la forme :

$$F + sO \rightarrow (1 + s)\, P , \tag{7.46}$$

où F représente le combustible (Fuel), O l'oxydant et s son coefficient stœchiométrique massique, et P représente les produits de la réaction.

En l'occurrence, il s'avère que la réaction hydrogène-oxygène est excessivement rapide et se place de manière très nette dans le cas $\mathrm{Da} \gg 1$. L'hypothèse de chimie infiniment rapide, selon laquelle la combustion est pilotée par le mélange turbulent, est donc justifiée.

7.3.2 Modèles de Spalding et Magnussen

Sous l'hypothèse de chimie infiniment rapide, le modèle de combustion turbulente le plus simple et le plus répandu est le ***modèle EBU*** (Eddy Break Up). Il a été développé par SPALDING [257] dans le contexte de la combustion turbulente prémélangée, et étendu ensuite par MAGNUSSEN et HJERTAGER [183] aux flammes de diffusion (il est alors généralement renommé ***modèle EDM*** pour Eddy Dissipation Model). Le modèle EBU de MAGNUSSEN et HJERTAGER [183], ou modèle EDM, postule que le taux de réaction de l'espèce combustible s'écrit :

$$\overline{\dot{\omega}_F} = \alpha \rho f_T \min\left(Y_F, \frac{Y_O}{s}, \beta \frac{Y_P}{1+s}\right), \tag{7.47}$$

où α et β sont deux constantes, et où f_T est une fréquence turbulente, que l'on exprime généralement dans une approche de la turbulence de type RANS avec modèle $k-\epsilon$ comme

$$f_T = \frac{\epsilon}{k}, \tag{7.48}$$

k étant l'énergie cinétique du mélange et ϵ sa dissipation. Selon ce modèle, le taux de réaction de l'espèce combustible est maximal lorsque les réactifs sont dans leurs proportions stœchiométriques, et à condition qu'une certaine quantité de gaz brûlés soit présente. Cette condition traduit le fait qu'une énergie minimale est nécessaire pour initier la réaction. Le taux de réaction diminue lorsque les réactifs ne sont plus dans les proportions stœchiométriques, puis s'annule lorsqu'un des deux réactifs a été entièrement consommé. Dans le cas de la combustion hydrogène-oxygène, la réaction irréversible considérée serait la suivante :

$$H_2 + sO_2 \rightarrow (1+s)\, H_2O\,. \tag{7.49}$$

Ou encore sous forme molaire :

$$H_2 + \nu O_2 \rightarrow H_2O\,, \tag{7.50}$$

où $\nu = 1/2$ est le coefficient stœchiométrique molaire de l'oxygène. Les coeffcients stœchiométriques massique et molaire sont liés par la relation suivante (M_{O_2} et M_{H_2} sont les masses molaires) :

$$s = \nu \frac{M_{O_2}}{M_{H_2}}\,. \tag{7.51}$$

A noter que ces modèles à chimie infiniment rapide, et supposant une seule réaction globale irréversible, ont été développés dans le cadre d'approches RANS de la turbulence. Cependant, rien n'interdit a priori l'utilisation de ce type de modèle dans une approche LES, même implicite. Il suffit d'utiliser par exemple une fréquence turbulente construite à partir de l'énergie cinétique turbulente et de sa dissipation de sous-maille telles que définies par les relations (5.77) et (5.78) au Chapitre 5. Évidemment, la constante de réaction α doit être ajustée.

Malheureusement, bien que ce modèle fournisse de bons résultats qualitatifs quant à l'allure générale de la flamme, il conduit à une température de flamme largement sur-estimée (MEYERS [194]). Cette imprécision est due à l'hypothèse d'une chimie globale à une seule réaction irréversible, alors qu'en réalité la combustion hydrogène-oxygène implique la dissociation de la molécule d'eau en espèces radicalaires OH, O et H, processus qui est endothermique. Il est donc nécessaire de prendre en compte cette dissociation si l'on souhaite obtenir une température de flamme correcte.

7.3.3 Modèle de relaxation vers l'équilibre

Il est possible d'obtenir une température de flamme correcte, tout en utilisant l'hypothèse de chimie infiniment rapide, et donc sans passer par la résolution d'une cinétique chimique. Le modèle de relaxation vers l'équilibre (MRE), disponible dans CEDRE, est basé sur le même principe que les modèles de Spading et Magnussen : les taux de réaction des espèces sont pilotés par un temps de mélange turbulent. En revanche, ils ne sont plus limités par la disparition des réactifs de la réaction globale, mais ils sont limités par l'équilibre thermodynamique local prenant en compte les espèces radicalaires OH, O et H. Ainsi, le taux de réaction d'une espèce i quelconque s'écrit :

$$\overline{\dot{\omega}_i} \;=\; \rho \min\left(C f_T, f_{max}\right)\left(Y_{i,eq} - Y_i\right) H\left(T - T_{inf}\right)\,, \qquad i \in \mathcal{R}\,, \tag{7.52}$$

où $\mathcal{R}$ est l'ensemble des espèces chimiques intervenant dans le calcul de l'équilibre chimique. Il s'agit donc des réactifs et des produits de combustion de la réaction globale, ainsi que des espèces radicalaires. Nous avons ainsi :

$$\mathcal{R} = \{O_2, H_2, H_2O, OH, O, H\}\,. \tag{7.53}$$

De plus, C est une constante de réaction et f_T est une fréquence turbulente. La fonction de Heaviside $H(\bullet)$ permet d'annuler les taux de réaction si la température est inférieure à une température d'inflammation T_{inf}. Il est également possible de limiter la vitesse de réaction par une fréquence maximale f_{max}. Les fractions massiques d'équilibre $Y_{i,eq}$ sont obtenues à chaque itération grâce à un calcul d'équilibre chimique basé sur la méthode des pseudo-réactions (GORDON et MCBRIDE [111]). L'équilibre chimique peut également être tabulé au début du calcul, ce qui permet d'économiser sa détermination à chaque itération.

Le modèle MRE sera utilisé au Chapitre 11 lors de la simulation finale de la configuration du banc Mascotte. Il est important de préciser qu'en dehors de l'amélioration sur la température de flamme, le modèle MRE possède les mêmes défauts que le modèle EBU de MAGNUSSEN et HJERTAGER [183]. Le comportement global de la flamme est directement piloté par la valeur de la constante de réaction, dont il est impossible de donner une valeur universelle. En pratique, il est nécessaire d'ajuster cette constante pour obtenir un comportement acceptable de la flamme, notamment en termes de longueur et d'angle d'ouverture. Il ne s'agit donc pas ici d'avoir une modélisation parfaitement prédictive. En effet, on ne s'intéresse pas en détail dans cette étude à la modélisation de la combustion turbulente. Il s'agit d'un aspect de notre stratégie qui pourra être amélioré ultérieurement et indépendamment des travaux présentés ici. Dans l'immédiat, l'objectif est de pouvoir mener à bien une simulation réactive sur la configuration du banc Mascotte, tout en ayant des propriétés globales correctes en termes de longueur et de température de flamme, ainsi que de pression de la chambre.

Chapitre 8

Méthodes numériques de résolution

Ce chapitre présente les méthodes numériques de résolution des systèmes d'équations des solveurs CHARME et SPIREE du code CEDRE, respectivement dédiés à la description du fluide et de la phase dispersée dans notre étude (cf. Chapitre 4). En considérant leur forme vectorielle (cf. Chapitre 5 et Chapitre 6), nous commençons par écrire la discrétisation de ces systèmes d'équations suivant la méthode des volumes finis sur maillages non structurés. Nous précisons ensuite les schémas de flux numériques utilisés. Le cas de chaque solveur doit être appréhendé de manière spécifique, la nature mathématique des systèmes d'équations étant différente. Les procédures disponibles dans CEDRE pour obtenir une précision à l'ordre 2 dans l'approximation des flux convectifs sont ensuite présentées. Elles s'appuient jusqu'à maintenant sur des approches MUSCL de type "gradient de maille limité" ou ***monopente****. Il s'avère que ce point est un élément sensible de notre stratégie, ayant justifié le développement d'une méthode nouvelle de type* ***multipente****, présentée au Chapitre 9. Pour terminer, nous présentons la stratégie d'intégration temporelle et les schémas d'avancement en temps utilisés.*

Sommaire

8.1 Discrétisation des systèmes d'équations selon la méthode des volumes finis en approche "cell-center" . . . 133
8.2 Schémas de flux numériques . . . 135
8.2.1 Approximation des flux convectifs dans CHARME . . . 135
8.2.2 Approximation des flux de diffusion dans CHARME . . . 140
8.2.3 Approximation des flux convectifs dans SPIREE . . . 141
8.3 Méthode MUSCL pour la discrétisation spatiale d'ordre 2 . . . 142
8.3.1 Procédures d'interpolations dans CEDRE . . . 143
8.3.2 Algorithmes de limitation des gradients de maille . . . 143
8.3.3 Choix des variables interpolées . . . 145
8.4 Intégration temporelle . . . 145
8.4.1 Splitting d'opérateurs . . . 146
8.4.2 Schémas d'avancement en temps . . . 147

Nous avons établi au Chapitre 6 le système d'équations global regroupant le système des équations du fluide (solveur CHARME), et les N_s systèmes d'équations de la phase dispersée (solveur SPIREE). Pour introduire la discrétisation, il est préférable de considérer les deux solveurs séparément. En effet, la nature mathématique faiblement hyperbolique des équations de SPIREE implique l'utilisation de schémas spécifiques par rapport au système des équations de Navier-Stokes. Réécrivons ici le système d'équations du solveur CHARME (dédié au fluide) sous forme vectorielle (cf. (5.29) au Chapitre 5) :

$$\frac{\partial \boldsymbol{Q}}{\partial t} + \nabla . \boldsymbol{F_C} = \nabla . \boldsymbol{F_D} + \boldsymbol{S} . \tag{8.1}$$

De même, réécrivons le système d'équations pour une section k, $1 \leq k \leq N_s$, sous forme vectorielle (cf. (6.8) au Chapitre 6) :

$$\frac{\partial \boldsymbol{Q}_d^{(k)}}{\partial t} + \nabla . \boldsymbol{F}_d^{(k)} = \boldsymbol{S}_d^{(k)} . \tag{8.2}$$

Pour simplifier l'écriture, nous allons omettre l'exposant (k) dans la suite de ce chapitre, et allons noter $\boldsymbol{Q}_d^{(k)} = \boldsymbol{q}$ le vecteur des variables conservées de la phase dispersée. Nous utiliserons donc l'écriture suivante des équations de la phase dispersée :

$$\frac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial t} + \nabla . \boldsymbol{F}_d = \boldsymbol{S}_d . \tag{8.3}$$

8.1 Discrétisation des systèmes d'équations selon la méthode des volumes finis en approche "cell-center"

Considérons le domaine de calcul $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, dont la frontière est notée $\partial\Omega$. Le domaine Ω est divisé en un ensemble de polyèdres K_i qui constituent les cellules du maillage. Chaque polyèdre possède un nombre quelconque de faces, elles-mêmes définies par un nombre quelconque de sommets (voir l'exemple de la Figure 8.1). On note $|K_i|$ le volume d'une cellule, et ∂K_i l'aire totale de ses faces. L'ensemble $\mathcal{V}(i)$ désigne le voisinage par faces de l'élément K_i, c'est-à-dire l'ensemble des éléments voisins K_j partageant une face S_{ij} avec K_i. De plus, $|S_{ij}|$ désigne l'aire de la face S_{ij}, et $\boldsymbol{n}_{ij}$ est un vecteur normal à cette face dirigé vers l'extérieur de la cellule K_i. Enfin, $\boldsymbol{B}_i$ et $\boldsymbol{M}_{ij}$ désignent les barycentres respectifs de la cellule K_i et de la face S_{ij}. A noter que ces définitions s'étendent facilement à des configurations bidimensionnelles, comme l'illustre la Figure 9.1 du Chapitre 9. Davantage de détails quant à la caractérisation des maillages non structurés généraux dans CEDRE sont disponibles dans les références COURBET et al. [49] et LETERRIER [177] (voir également le Chapitre 9).

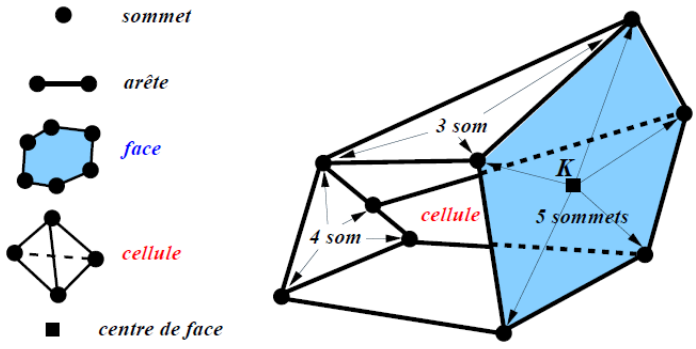


FIGURE 8.1 – *Cellule de calcul polyédrique quelconque dans CEDRE.*

La méthode des volumes finis appliquée aux systèmes (8.1) et (8.3) consiste à intégrer ces systèmes sur les volumes de contrôle définis par les cellules K_i :

$$\begin{cases} \displaystyle\int_{K_i} \frac{\partial \boldsymbol{Q}}{\partial t} \mathrm{d}V + \int_{K_i} \nabla . \boldsymbol{F_C} \, \mathrm{d}V = \int_{K_i} \nabla . \boldsymbol{F_D} \, \mathrm{d}V + \int_{K_i} \boldsymbol{S} \, \mathrm{d}V \\ \displaystyle\int_{K_i} \frac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial t} \mathrm{d}V + \int_{K_i} \nabla . \boldsymbol{F_d} \, \mathrm{d}V = \int_{K_i} \boldsymbol{S_d} \, \mathrm{d}V \end{cases} \tag{8.4}$$

Le théorème de Green-Ostrogradski relie l'intégrale de la divergence d'un vecteur à l'intégrale de surface du flux défini par ce vecteur. Il nous permet d'écrire ici, pour un champ de vecteur $\boldsymbol{A}$ quelconque, et avec $\boldsymbol{n}$ le vecteur

normal extérieur en tout point de la frontière ∂K_i :

$$\int_{K_i} \nabla.\boldsymbol{A}\,\mathrm{d}V = \int_{\partial K_i} \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}S\ . \tag{8.5}$$

De plus, dans l'approche volumes finis "cell-center", les variables sont évaluées au centre des cellules, selon l'approximation

$$\left\{\begin{array}{lcll} \boldsymbol{Q}_i & \overset{\text{def}}{=} & \boldsymbol{Q}(\boldsymbol{B}_i) & \approx \dfrac{1}{|K_i|}\displaystyle\int_{K_i}\boldsymbol{Q}\,\mathrm{d}V \\ \boldsymbol{q}_i & \overset{\text{def}}{=} & \boldsymbol{q}(\boldsymbol{B}_i) & \approx \dfrac{1}{|K_i|}\displaystyle\int_{K_i}\boldsymbol{q}\,\mathrm{d}V \end{array}\right. . \tag{8.6}$$

La même approximation est utilisée concernant les termes sources :

$$\left\{\begin{array}{ll} \boldsymbol{S}(\boldsymbol{Q}_i) & \approx \dfrac{1}{|K_i|}\displaystyle\int_{K_i}\boldsymbol{S}\,\mathrm{d}V \\ \boldsymbol{S_d}(\boldsymbol{q}_i) & \approx \dfrac{1}{|K_i|}\displaystyle\int_{K_i}\boldsymbol{S_d}\,\mathrm{d}V \end{array}\right. . \tag{8.7}$$

En permutant les opérateurs de dérivation et d'intégration temporelle, et en utilisant le théorème de Green-Ostrogradski, il est possible d'écrire

$$\left\{\begin{array}{lcll} |K_i|\dfrac{\partial \boldsymbol{Q}_i}{\partial t} & + & \displaystyle\int_{\partial K_i}(\boldsymbol{F_C}-\boldsymbol{F_D})\cdot\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}S & = |K_i|\,\boldsymbol{S}(\boldsymbol{Q}_i) \\ |K_i|\dfrac{\partial \boldsymbol{q}_i}{\partial t} & + & \displaystyle\int_{\partial K_i}\boldsymbol{F_d}\cdot\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}S & = |K_i|\,\boldsymbol{S_d}(\boldsymbol{q}_i) \end{array}\right. . \tag{8.8}$$

Chaque cellule K_i étant polyédrique, il vient ensuite

$$\left\{\begin{array}{lcll} |K_i|\dfrac{\partial \boldsymbol{Q}_i}{\partial t} & + & \displaystyle\sum_{j\in\mathcal{V}(i)}\int_{S_{ij}}(\boldsymbol{F_C}-\boldsymbol{F_D})\cdot\boldsymbol{n}_{ij}\,\mathrm{d}S & = |K_i|\,\boldsymbol{S}(\boldsymbol{Q}_i) \\ |K_i|\dfrac{\partial \boldsymbol{q}_i}{\partial t} & + & \displaystyle\sum_{j\in\mathcal{V}(i)}\int_{S_{ij}}\boldsymbol{F_d}\cdot\boldsymbol{n}_{ij}\,\mathrm{d}S & = |K_i|\,\boldsymbol{S_d}(\boldsymbol{q}_i) \end{array}\right. . \tag{8.9}$$

A ce stade, on associe à chaque vecteur flux $\boldsymbol{F}$ une fonction de flux numérique ϕ, dont le but est d'approximer l'intégrale du flux sur une face :

$$\left\{\begin{array}{ll} \phi_C\left(\boldsymbol{Q}_i,\boldsymbol{Q}_j,\boldsymbol{n}_{ij}\right) & \approx \dfrac{1}{|S_{ij}|}\displaystyle\int_{S_{ij}}\boldsymbol{F_C}\cdot\boldsymbol{n}_{ij}\,\mathrm{d}S \\ \phi_D\left(\boldsymbol{Q}_i,\boldsymbol{Q}_j,\boldsymbol{n}_{ij}\right) & \approx \dfrac{1}{|S_{ij}|}\displaystyle\int_{S_{ij}}\boldsymbol{F_D}\cdot\boldsymbol{n}_{ij}\,\mathrm{d}S \\ \phi_d\left(\boldsymbol{q}_i,\boldsymbol{q}_j,\boldsymbol{n}_{ij}\right) & \approx \dfrac{1}{|S_{ij}|}\displaystyle\int_{S_{ij}}\boldsymbol{F_d}\cdot\boldsymbol{n}_{ij}\,\mathrm{d}S \end{array}\right. . \tag{8.10}$$

La discrétisation en volumes finis des systèmes d'équations du fluide (solveur CHARME) et d'une section de la phase dispersée (solveur SPIREE) s'écrit donc finalement :

$$\boxed{\left\{\begin{array}{lcll} \dfrac{\partial \boldsymbol{Q}_i}{\partial t} & + & \displaystyle\sum_{j\in\mathcal{V}(i)}\frac{|S_{ij}|}{|K_i|}\Big[\phi_C\left(\boldsymbol{Q}_i,\boldsymbol{Q}_j,\boldsymbol{n}_{ij}\right)-\phi_D\left(\boldsymbol{Q}_i,\boldsymbol{Q}_j,\boldsymbol{n}_{ij}\right)\Big] & = \boldsymbol{S}(\boldsymbol{Q}_i) \\ \dfrac{\partial \boldsymbol{q}_i}{\partial t} & + & \displaystyle\sum_{j\in\mathcal{V}(i)}\frac{|S_{ij}|}{|K_i|}\phi_d\left(\boldsymbol{q}_i,\boldsymbol{q}_j,\boldsymbol{n}_{ij}\right) & = \boldsymbol{S_d}(\boldsymbol{q}_i) \end{array}\right.} \tag{8.11}$$

Nous venons d'écrire la méthode des volumes finis appliquée aux systèmes d'équations selon une formulation :

- ***semi-discrète***. Il reste encore à proposer une stratégie d'intégration temporelle, ce qui fera l'objet du paragraphe § 8.4.

– ***d'ordre 1 en espace***. Dans (8.11), les schémas de flux prennent pour arguments les valeurs moyennes $\boldsymbol{Q}_i$, $\boldsymbol{Q}_j$, $\boldsymbol{q}_i$ et $\boldsymbol{q}_j$ stockées aux centres des cellules, ce qui aboutit à l'ordre 1 en espace pour la partie convective des équations. Afin de réduire la diffusion numérique, une discrétisation spatiale d'ordre 2 peut être obtenue en suivant la technique MUSCL. Les valeurs aux centres des cellules sont remplacées par des interpolations aux faces, sans modifier l'expression des flux numériques (cf. § 8.3).

8.2 Schémas de flux numériques

Les fonctions de flux numérique ϕ_C et ϕ_d sont toutes deux dédiées à l'approximation des flux convectifs, respectivement pour le fluide et pour la phase dispersée. Elles sont différentes en raison de la nature mathématique spécifique de chaque système. Cependant, nous allons voir qu'il s'agit dans les deux cas de ***flux numériques décentrés de type*** **GODUNOV** ***[108]***, nécessitant la résolution de ***problèmes de Riemann***, exacts ou approchés.

8.2.1 Approximation des flux convectifs dans CHARME

Il s'agit ici de fournir l'expression du flux numérique ϕ_C apparaissant dans le système volumes finis (8.11). Or, les équations du fluide résolues par le solveur CHARME ne sont autres que les équations d'Euler pour la partie convective, auxquelles sont ajoutés des termes de diffusion et des termes sources. Les méthodes numériques utilisées pour approximer les flux convectifs proviennent donc de la littérature classique dédiée aux équations d'Euler. Nous présentons ici ces méthodes dans le cadre simplifié des équations d'Euler mono-espèces et monodimensionnelles [1]. Le lecteur intéressé par l'analyse numérique des équations d'Euler est invité à consulter les ouvrages de référence de DESPRÉS [64], GODLEWSKI et RAVIART [107], TORO [267] et LEVEQUE [172].

Équations d'Euler compressibles mono-espèces 1D

Les équations d'Euler, sous forme vectorielle, pour une dimension d'espace et pour une seule espèce chimique, s'écrivent

$$\frac{\partial \boldsymbol{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \boldsymbol{F}(\boldsymbol{Q})}{\partial x} = 0\,, \tag{8.12}$$

le vecteur des quantités conservées $\boldsymbol{Q}(x,t)$ et le vecteur flux $\boldsymbol{F}\left[\boldsymbol{Q}(x,t)\right]$ étant dans ce cas définis par

$$\boldsymbol{Q} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ E \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{F}(\boldsymbol{Q}) = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + P \\ (E+P)\,u \end{pmatrix}. \tag{8.13}$$

On utilise également le vecteur des variables primitives $\boldsymbol{U}$, défini ici par

$$\boldsymbol{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ u \\ P \end{pmatrix}. \tag{8.14}$$

Le système des équations d'Euler est ***strictement hyperbolique***, c'est-à-dire que la matrice jacobienne $\partial \boldsymbol{F}/\partial \boldsymbol{Q}$ est diagonalisable. Elle possède trois valeurs propres réelles distinctes, et un ensemble de vecteurs propres à droite engendrant l'espace $\mathbb{R}^3$ (dans le cas considéré ici, c'est-à-dire monodimensionnel et mono-espèce). Les trois valeurs propres s'expriment

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= u - c\,, \\ \lambda_2 &= u\,, \\ \lambda_3 &= u + c\,, \end{aligned} \tag{8.15}$$

où c est la vitesse du son, définie thermodynamiquement par la relation (cf. Chapitre 5) :

$$c^2 = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_s. \tag{8.16}$$

1. En effet, lorsque l'on évalue les flux numériques aux interfaces du maillage, la projection des équations d'Euler (invariantes par rotation) dans le repère local lié à l'interface, permet de se ramener en pratique à un problème monodimensionnel (DESPRÉS [64]).

Problème de Riemann associé

Le problème de Riemann consiste à chercher la solution des équations d'Euler munies d'une condition initiale discontinue du type

$$\boldsymbol{U}(x, t=0) = \boldsymbol{U}_0(x) = \begin{cases} \boldsymbol{U}_L & \text{si} \quad x < 0 \\ \boldsymbol{U}_R & \text{si} \quad x > 0 \end{cases} . \tag{8.17}$$

Le problème de Riemann est à la base de la résolution numérique des équations d'Euler par la méthode des volumes finis, puisque celle-ci consiste à projeter la solution sur des fonctions continues par morceaux. Ainsi, le flux numérique ϕ_C que nous avons introduit en § 8.1 doit justement résoudre un problème de Riemann au niveau de chaque face du maillage. Dans le cas des équations d'Euler 1D, le problème de Riemann possède une infinité de solutions dites auto-similaires, c'est-à-dire ne dépendant que du rapport x/t. La structure de la solution est une combinaison possible de trois types d'ondes, associées aux valeurs propres $\lambda_1 = u - c$, $\lambda_2 = u$ et $\lambda_3 = u + c$ de la matrice jacobienne, et séparant au maximum quatre états constants, notés $\boldsymbol{U}_L$, $\boldsymbol{U}_L^*$, $\boldsymbol{U}_R^*$ et $\boldsymbol{U}_R$ (cf. Figure 8.2). Les trois ondes possibles sont :

- une onde de choc, à travers laquelle $\boldsymbol{U}(x,t)$ est discontinu.
- un faisceau de détente isentropique (aussi appelé onde de raréfaction), dans lequel $\boldsymbol{U}(x,t)$ est continu.
- une discontinuité de contact, à travers laquelle P et u sont continues, seule la densité ρ étant discontinue.

L'onde centrale est toujours une discontinuité de contact, tandis que les ondes de gauche et de droite sont soit une onde de choc soit un faisceau de détente. Ainsi, il existe quatre combinaisons possibles de ces trois ondes [2] (cf. Figure 8.3) :

(i) choc à gauche, discontinuité de contact, choc à droite.

(ii) détente à gauche, discontinuité de contact, détente à droite.

(iii) choc à gauche, discontinuité de contact, détente à droite.

(iv) détente à gauche, discontinuité de contact, choc à droite.

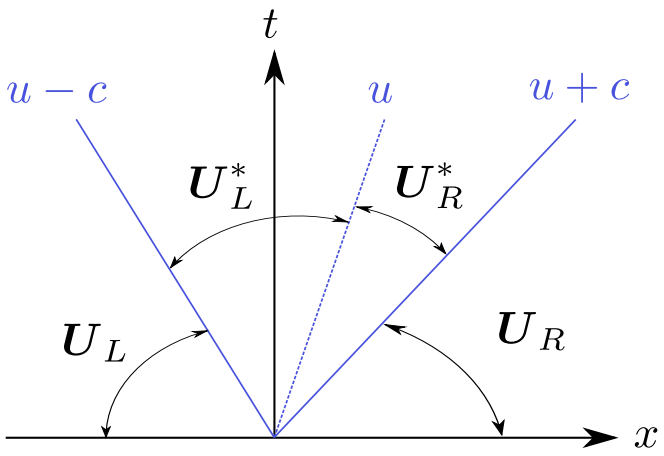


FIGURE 8.2 – *Structure de la solution du problème de Riemann pour les équations d'Euler 1D.*

La résolution exacte du problème de Riemann nécessite donc la détermination des états dans la ***région étoilée***, entre les ondes de gauche et de droite. Puisqu'il y a continuité de la pression et de la vitesse à travers la discontinuité de contact, cela revient à déterminer quatre états : u^*, P^*, ρ_L^* et ρ_R^*.

Classification des schémas numériques pour les équations d'Euler

Les schémas numériques développés pour la résolution des équations aux dérivées partielles hyperboliques, telles que les équations d'Euler, doivent vérifier certaines propriétés essentielles, introduites le plus souvent dans le cadre des méthodes aux différences finies :

- ***la stabilité***. Un schéma est stable si la différence entre la solution exacte et la solution numérique reste bornée.
- ***la consistance***. Un schéma est consistant si l'erreur de troncature, différence entre l'équation aux dérivées partielles exacte et l'équation discrétisée, tend vers zéro lorsque les pas de temps et d'espace tendent vers zéro.

2. En excluant la possibilité que la solution initiale contienne une zone de vide.

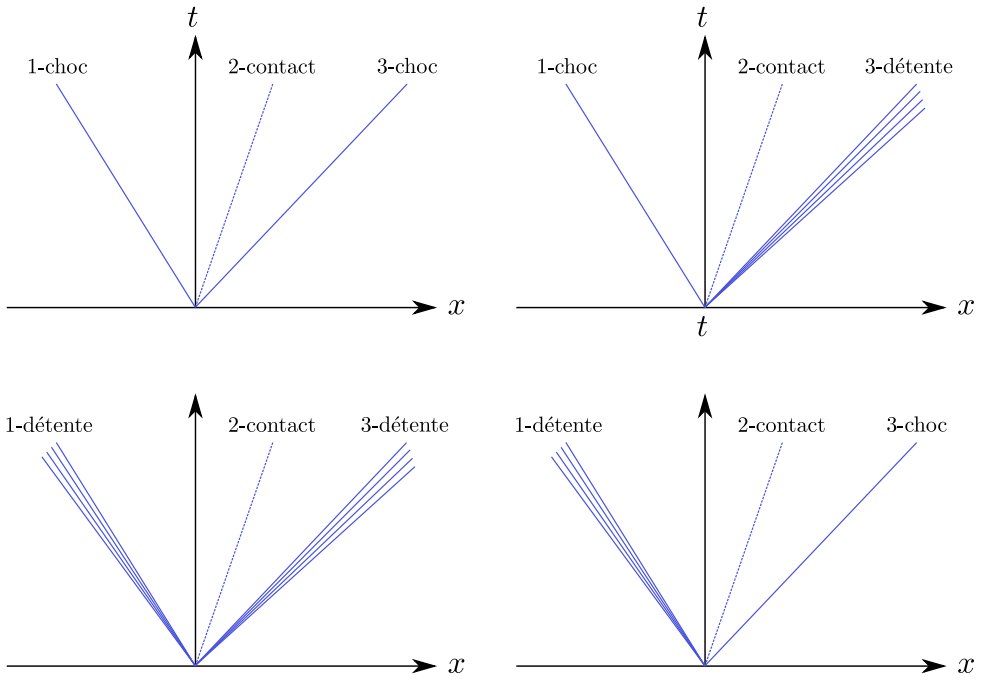


FIGURE 8.3 – ***Combinaisons possibles dans la solution du problème de Riemann pour les équations d'Euler 1D.***

– ***la convergence***. Il s'agit d'une propriété globale du schéma qui garantit que l'écart entre la solution approchée et la solution exacte tend vers zéro lorsque les pas de discrétisation tendent vers zéro. La convergence est très difficile à prouver en pratique, dans la mesure où l'on ne connait généralement pas la solution exacte. Il est cependant possible de la démontrer en utilisant le ***théorème de Lax***. Celui-ci établit le résultat selon lequel la ***stabilité*** et la ***consistance*** d'un schéma numérique sont des conditions nécessaires et suffisantes pour obtenir sa ***convergence***.

Parmi les schémas les plus utilisés pour la résolution numérique des équations d'Euler selon la méthode des volumes finis, on trouve (GONCALVÈS DA SILVA [109], TORO [267]) :

– les ***schémas centrés avec dissipation artificielle*** (JAMESON et al. [147]).

– les ***schémas décentrés à décomposition de flux*** ou Flux Vector Splitting (FVS), développés principalement par STEGER et WARMING [259] et van LEER [277], où le flux numérique est décomposé suivant le signe des valeurs propres de la matrice jacobienne. Ces schémas sont connus pour être plus robustes et plus simples à mettre en œuvre que les schémas de type Godunov (ils ne nécessitent pas la résolution d'un problème de Riemann). Ils sont en revanche beaucoup plus dissipatifs, et ont donc surtout été utilisés dans les calculs implicites pour la recherche de solutions stationnaires (TORO [267]).

– les ***schémas décentrés de type Godunov*** ou Flux Difference Splitting (FDS), basés sur la résolution d'un problème de Riemann exact ou approché, parmi lesquels on trouve plus particulièrement :
  • des solveurs de Riemann exacts, selon la méthode de GODUNOV [108]. En pratique, la résolution exacte du problème de Riemann non linéaire se révèle très coûteuse et est donc peu utilisée.
  • des solveurs basés sur la résolution exacte d'un problème de Riemann approché (la matrice jacobienne est par exemple linéarisée). Le schéma de ROE [231] en constitue l'exemple le plus connu, mais d'autres schémas plus récents de type VFRoe ont été développés (BUFFARD et al. [30]).
  • des solveurs basés sur la résolution approchée du problème de Riemann exact (non linéaire). On trouve dans cette catégorie le schéma HLL (HARTEN et al. [134]) et ses dérivés HLLE (EINFELDT [84]) et HLLC (TORO et al. [268]). Cette catégorie de schémas, connue pour sa grande robustesse, est celle qui a été retenue dans cette étude. Par conséquent, nous la présenterons plus en détail dans les paragraphes suivants.

  Les schémas FDS sont potentiellement moins robustes et plus complexes à mettre en œuvre que les schémas FVS, mais ils sont plus précis.

– les ***schémas décentrés hybrides FVS / FDS*** de la famille AUSM (LIOU [178–180]). Ces schémas sont sensés combiner la précision des schémas FDS et la robustesse des schémas FVS, en traitant les ondes acoustiques et la convection de manière différente.

– les ***schémas ENO*** (Essentially Non-Oscillatory) développés par HARTEN et al. [133] et SHU et OSHER [247,

248] et leur extension ***WENO*** (Weighted ENO) due à LIU et al. [182] et JIANG et SHU [151]. Ces schémas sont les plus précis mais ils sont également plus coûteux et beaucoup plus complexes à mettre en œuvre sur maillages non structurés.

Un solveur approché du problème de Riemann exact : le schéma HLL

Dans le schéma HLL proposé par HARTEN et al. [134], on considère seulement trois états constants séparés par les deux ondes de vitesse maximale de chaque côté de l'interface (cf. Figure 8.4). L'évaluation de ces vitesses maximales, notées S_L et S_R, n'est pas triviale (cf. § "Estimation des vitesses des ondes"). L'état intermédiaire constant entre les deux ondes est noté $\boldsymbol{Q}_{HLL}$, et donc la discontinuité de contact de la solution exacte du problème de Riemann n'est pas prise en compte. L'état $\boldsymbol{Q}_{HLL}$ correspond à une valeur moyenne de la solution exacte du problème de Riemann, intégrée entre les deux ondes de vitesse maximale émanant de l'interface. Il est obtenu par la relation :

$$\boldsymbol{Q}_{HLL} = \frac{S_R \boldsymbol{Q}_R - S_L \boldsymbol{Q}_L + \boldsymbol{F}_L - \boldsymbol{F}_R}{S_R - S_L} , \tag{8.18}$$

où $\boldsymbol{F}_L = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{Q}_L)$ et $\boldsymbol{F}_R = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{Q}_R)$. Le flux numérique basé sur le solveur HLL s'écrit alors

$$\phi_C^{HLL} = \begin{cases} \boldsymbol{F}_L & \text{si} \quad 0 < S_L \\ \boldsymbol{F}_{HLL} & \text{si} \quad S_L < 0 < S_R \\ \boldsymbol{F}_R & \text{si} \quad 0 > S_R \end{cases} , \tag{8.19}$$

avec

$$\boldsymbol{F}_{HLL} = \boldsymbol{F}_L + S_L(\boldsymbol{Q}_{HLL} - \boldsymbol{Q}_L) = \boldsymbol{F}_R + S_R(\boldsymbol{Q}_{HLL} - \boldsymbol{Q}_R) = \frac{S_R \boldsymbol{F}_L - S_L \boldsymbol{F}_R + S_L S_R (\boldsymbol{Q}_R - \boldsymbol{Q}_L)}{S_R - S_L} . \tag{8.20}$$

Le solveur HLL est reconnu pour sa très grande robustesse. Il est bien adapté aux systèmes hyperboliques à deux équations de conservation, tels que les équations de Saint-Venant, pour lesquels il n'existe que deux valeurs propres. En revanche, il peut s'avérer très imprécis dans le cadre des équations d'Euler en raison de l'hypothèse effectuée concernant la configuration des ondes. En particulier, le cas d'une interface matérielle est très mal représenté du fait de l'absence de la discontinuité de contact. C'est pourquoi une extension du schéma HLL a été proposée par TORO et al. [268] afin de restaurer la discontinuité de contact. Il s'agit du schéma HLLC, la lettre C signifiant d'ailleurs "contact".

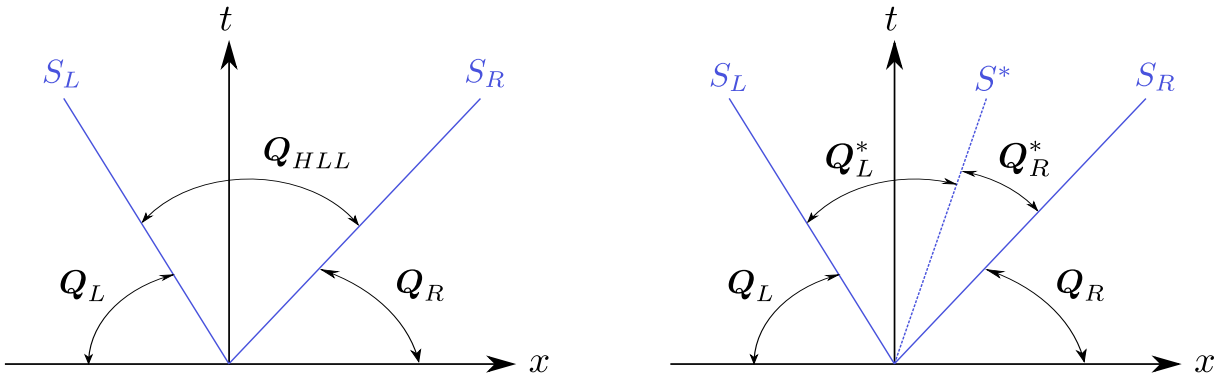


FIGURE 8.4 – ***Hypothèses sur la configuration des ondes dans les solveurs HLL (gauche) et HLLC (droite).***

Restauration de la discontinuité de contact : le schéma HLLC

Le schéma HLLC de TORO et al. [268] reprend le principe du solveur HLL mais en considérant une onde intermédiaire supplémentaire, liée à la valeur propre $\lambda_2 = u$. La vitesse de cette onde est notée S^* et son expression est donnée au paragraphe § "Estimation des vitesses des ondes". Les trois ondes de vitesse S_L, S^* et S_R séparent alors quatre états : $\boldsymbol{Q}_L$, $\boldsymbol{Q}_L^*$, $\boldsymbol{Q}_R^*$ et $\boldsymbol{Q}_R$ (cf. Figure 8.4). Le schéma de flux numérique correspondant s'écrit :

$$\phi_C^{HLLC} = \begin{cases} \boldsymbol{F}_L & \text{si} \quad 0 < S_L \\ \boldsymbol{F}_L^* & \text{si} \quad S_L < 0 < S^* \\ \boldsymbol{F}_R^* & \text{si} \quad S^* < 0 < S_R \\ \boldsymbol{F}_R & \text{si} \quad 0 > S_R \end{cases} . \tag{8.21}$$

En appliquant les relations de Rankine-Hugoniot à travers chacune des ondes de vitesse S_L, S^* et S_R, on montre que

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \boldsymbol{F}_L^* & = & \boldsymbol{F}_L + S_L\left(\boldsymbol{Q}_L^* - \boldsymbol{Q}_L\right) \\ \boldsymbol{F}_R^* & = & \boldsymbol{F}_R + S_R\left(\boldsymbol{Q}_R^* - \boldsymbol{Q}_R\right) \end{array} \right. . \tag{8.22}$$

Ainsi, il ne reste qu'à déterminer les états intermédiaires $\boldsymbol{Q}_L^*$ et $\boldsymbol{Q}_R^*$. Or, on peut montrer que ces états sont reliés à l'état intermédiaire du solveur HLL et aux vitesses des ondes (condition de consistance) de la manière suivante :

$$\boldsymbol{Q}_{HLL} = \frac{S^* - S_L}{S_R - S_L}\boldsymbol{Q}_L^* + \frac{S_R - S^*}{S_R - S_L}\boldsymbol{Q}_R^* . \tag{8.23}$$

Cependant, avec une seule relation et deux inconnues, le problème n'est pas encore fermé. Il est donc nécessaire d'imposer des conditions supplémentaires, obtenues simplement à partir des conditions vérifiées par la solution exacte. En effet, puisque l'onde intermédiaire de vitesse S^* est une discontinuité de contact, il y a continuité de la pression et de la vitesse, et on a donc

$$\left\{ \begin{array}{rcccl} P_L^* & = & P_R^* & = & P^* \\ u_L^* & = & u_R^* & = & u^* \end{array} \right. . \tag{8.24}$$

De plus, il est justifié de considérer l'égalité $u^* = S^*$. Ainsi, si on dispose d'une estimation pour S^* (cf. § "Estimation des vitesses des ondes"), la vitesse intermédiaire u^* est fermée. On montre finalement que les états intermédiaires peuvent être formulés comme

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \boldsymbol{Q}_L^* & = & \dfrac{S_L\boldsymbol{Q}_L - \boldsymbol{F}_L + P_L^*\boldsymbol{D}^*}{S_L - S^*} \\ \boldsymbol{Q}_R^* & = & \dfrac{S_R\boldsymbol{Q}_R - \boldsymbol{F}_R + P_R^*\boldsymbol{D}^*}{S_R - S^*} \end{array} \right. , \tag{8.25}$$

avec

$$\left\{ \begin{array}{rcl} P_L^* & = & P_L + \rho_L\left(S_L - u_L\right)\left(S^* - u_L\right) \\ P_R^* & = & P_R + \rho_R\left(S_R - u_R\right)\left(S^* - u_R\right) \end{array} \right. , \tag{8.26}$$

et

$$\boldsymbol{D}^* = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ S^* \end{pmatrix} . \tag{8.27}$$

Cette solution est une des variantes possibles du schéma HLLC (TORO [267]). Par ailleurs, il est à noter que le schéma HLLC a été présenté ici dans un contexte monodimensionnel et mono-espèce par souci de simplicité. Cependant, la généralisation au cas multi-dimensionnel et multi-espèces ne pose pas de difficultés particulières (TORO [267]). Les relations écrites dans ce paragraphe sont également valables quelle que soit la loi d'état thermodynamique utilisée pour fermer le système. La loi d'état n'intervient que dans l'estimation des vitesses des ondes. Un bon résumé de la mise en application pratique du schéma HLLC est disponible dans TORO, p.331 [267].

Estimation des vitesses des ondes

Concernant la vitesse des ondes S_L et S_R, une possibilité proposée par DAVIS [54] est de prendre :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} S_L & = & \min\left(u_l - c_l, u_r - c_r\right) \\ S_R & = & \max\left(u_l + c_l, u_r + c_r\right) \end{array} \right. . \tag{8.28}$$

Cette solution est la plus simple mais n'est pas recommandée en pratique (TORO [267]). Un meilleur choix semble celui proposé par DAVIS [54] et EINFELDT [84], consistant à utiliser la moyenne de ROE [231] :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} S_L & = & \hat{u} - \hat{c} \\ S_R & = & \hat{u} + \hat{c} \end{array} \right. , \tag{8.29}$$

où $\hat{u}$ et $\hat{c}$ désignent les moyennes de Roe de la vitesse et de la vitesse du son, définies comme

$$\hat{u} = \frac{\sqrt{\rho_L}u_L + \sqrt{\rho_R}u_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} , \tag{8.30}$$

et

$$\hat{c}^2 = (\gamma - 1)\left(\hat{H} - \frac{1}{2}\hat{u}^2\right) , \tag{8.31}$$

où l'enthalpie totale $H = (E + P)/\rho$ est estimée par la valeur moyenne :

$$\hat{H} = \frac{\sqrt{\rho_L} H_L + \sqrt{\rho_R} H_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} . \tag{8.32}$$

On note que la formulation de la moyenne de Roe pour la vitesse du son utilise ici la loi d'état des gaz parfaits et suppose une valeur uniforme du coefficient isentropique γ. Pour ce qui est de la vitesse de l'onde intermédiaire dans le schéma HLLC, TORO et al. [268] indiquent que la continuité de la pression $P_L^* = P_R^* = P^*$ permet d'écrire :

$$S^* = \frac{P_R - P_L + \rho_L u_L (S_L - u_L) - \rho_R u_R (S_R - u_R)}{\rho_L (S_L - u_L) - \rho_R (S_R - u_R)} . \tag{8.33}$$

Correction du schéma HLLC dans la limite des faibles nombres de Mach

Il est connu que les schémas numériques décentrés construits pour les équations d'Euler compressibles éprouvent des difficultés à décrire les écoulements à faible nombre de Mach (VOLPE [294]). En effet, il a été démontré que les solutions discrètes des équations d'Euler compressibles dans la limite incompressible (Ma $\to$ 0) ne sont pas solutions des équations d'Euler incompressibles (GUILLARD [121]). Il en résulte un coût de calcul élevé (besoin d'un nombre CFL bas, convergence très lente vers l'état stationnaire), mais également des problèmes de précision. Évidemment, il existe des codes de calcul résolvant les équations d'Euler incompressibles et qui sont performants pour décrire les écoulements à très bas Mach. Cependant, dans un certain nombre d'applications réelles, la plage des nombres de Mach peut être très large et s'étendre par exemple de la limite incompressible à l'hypersonique, c'est-à-dire de Ma $\to$ 0 à Ma $\gg$ 1. Dans une certaine mesure, c'est le cas de la configuration Mascotte présentée au Chapitre 1. Le jet d'oxygène liquide est injecté à basse vitesse, avec un nombre de Mach très faible typique d'un régime quasi-incompressible (cf. le Tableau 1.2 du Chapitre 1), alors que l'écoulement en sortie de tuyère est supersonique.

Afin d'améliorer la convergence dans les simulations stationnaires, des techniques de préconditionnement ont d'abord été développées. Elles consistent à multiplier l'opérateur d'intégration temporelle du système par une matrice dite de préconditionnement (TURKEL [271–273]). Ces techniques ne sont applicables que pour la recherche de solutions stationnaires dans la mesure où elles n'assurent pas la consistance en temps des schémas. Certains auteurs ont ensuite eu l'idée d'utiliser ces méthodes de préconditionnement de manière différente, en les appliquant uniquement au terme de viscosité artificielle du flux convectif. Ce faisant, la consistance en temps est préservée et les problèmes de précision à bas-Mach peuvent être significativement réduits (GUILLARD [120–123], MURRONE et GUILLARD [202]).

Le code CEDRE dispose d'une version corrigée du solveur HLLC, nommée HLLC bas-Mach (SCHERRER [240], ZUZIO et al. [308]). Le principe consiste à agir sur les flux de quantité de mouvement en réduisant l'écart entre la vitesse du son et la vitesse convective. Pour cela, cet écart est multiplié par une fonction $f_{BM} \in [0, 1]$ qui prend pour arguments les nombres de Mach, pressions et densités de part et d'autre de l'interface où est évalué le flux numérique. Elle croît avec le nombre de Mach et tend rapidement vers 1, ainsi le flux numérique HLLC bas-Mach dégénère vers le flux HLLC classique hors de la limite incompressible. Ce schéma HLLC bas-Mach est celui qui sera utilisé pour la simulation numérique du banc Mascotte au Chapitre 11.

8.2.2 Approximation des flux de diffusion dans CHARME

Le rôle de la fonction flux numérique ϕ_D, introduite en § 8.1, est d'approximer le vecteur $\boldsymbol{F}_D$ des flux de diffusion. Or, nous avons vu au Chapitre 5 que les flux de diffusion d'espèces, de quantité de mouvement et d'énergie sont des fonctions des ***gradients des variables d'état***. Ils dépendent également de coefficients de transport (diffusivité, viscosité, conductivité thermique), eux-mêmes fonctions des ***variables d'état*** (cf. § 5.3). En d'autres termes, la dépendance des flux de diffusion est telle que

$$\boldsymbol{F}_D = \boldsymbol{F}_D (\boldsymbol{U}, \nabla \boldsymbol{U}) , \tag{8.34}$$

où $\boldsymbol{U}$ est le vecteur des variables d'état et $\nabla \boldsymbol{U}$ son gradient. Ainsi, puisque dans la formulation volumes finis les flux de diffusion sont évalués aux interfaces entre volumes de contrôle, il est nécessaire de procéder à une interpolation de $\boldsymbol{U}$ et de $\nabla \boldsymbol{U}$ au niveau des interfaces du maillage. Cette interpolation est strictement indépendante de celle réalisée dans le cadre de la technique MUSCL pour l'approximation des flux convectifs (cf. § 8.3). Il s'agit ici de calculer de simples moyennes pondérées à partir des états et des gradients dans les cellules K_i et K_j (flux centrés) :

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \boldsymbol{U}_{ij} & = & f\left(\boldsymbol{U}_i, \boldsymbol{U}_j\right) \\ (\nabla \boldsymbol{U})_{ij} & = & f_\nabla \left(\boldsymbol{U}_i, \boldsymbol{U}_j, (\nabla \boldsymbol{U})_i, (\nabla \boldsymbol{U})_j\right) \end{array} \right. . \tag{8.35}$$

La pondération prend en compte les distances respectives à la face S_{ij} des barycentres de cellule $\boldsymbol{B}_i$ et $\boldsymbol{B}_j$. Ce faisant, il suffit d'utiliser les modèles du paragraphe § 5.2, qui définissent le vecteur $\boldsymbol{F}_D$, pour évaluer le flux numérique ϕ_D :

$$\phi_D = \boldsymbol{F}_D\left(\boldsymbol{U}_{ij}, (\nabla \boldsymbol{U})_{ij}\right) . \tag{8.36}$$

Nous ne donnons pas plus de détails ici à propos de l'évaluation des flux de diffusion dans CHARME, et renvoyons le lecteur vers la thèse de LETERRIER [177].

8.2.3 Approximation des flux convectifs dans SPIREE

L'objectif de ce paragraphe est de fournir l'expression du flux numérique ϕ_d qui apparait dans le système volumes finis (8.11). Comme nous l'avons souligné à plusieurs reprises au Chapitre 3, la nature mathématique du système des équations de conservation de la phase dispersée est similaire à ce que l'on rencontre en ***dynamique des gaz sans pression***. En effet, le système est semblable à celui des équations d'Euler compressibles, à la différence notable de l'absence de terme de pression dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement. Par conséquent, le système n'est que ***faiblement hyperbolique***. La matrice jacobienne du vecteur des flux convectifs, $\partial \boldsymbol{F}_d / \partial \boldsymbol{q}$, ne possède qu'une seule valeur propre de multiplicité 3 (en 1D) : la vitesse des particules. Elle n'est donc pas diagonalisable, ce qui interdit l'utilisation des schémas classiques de la dynamique des gaz.

Une des conséquences directes de la faible hyperbolicité est le développement possible de ***δ-chocs*** dans la solution, causés par l'absence de propagation acoustique (BOUCHUT et al. [26]), et qui sont responsables de zones d'accumulations non physiques de particules. Contrairement au cas des équations d'Euler, la création de zones de vide est aussi une solution possible du système. Pour ces raisons, il est impossible d'utiliser les schémas classiques développés pour les équations d'Euler (cf. § 8.2.1), et des schémas dédiés doivent être utilisés. Nous présentons ici l'un des deux schémas de flux intégrés au solveur SPIREE, et que nous utilisons dans cette étude. Il s'agit d'un schéma de type Godunov, basé sur la résolution exacte du problème de Riemann aux interfaces.

Problème de Riemann associé au système d'équations de la phase dispersée

De la même manière qu'en § 8.2.1 pour les équations d'Euler, nous allons considérer ici une configuration monodimensionnelle. Les termes sources sont omis afin de mettre l'accent sur la partie transport. Dans ce cas, le système d'équations pour la phase dispersée s'écrit sous forme vectorielle :

$$\frac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial t} + \frac{\partial \boldsymbol{F}_d(\boldsymbol{q})}{\partial x} = 0 . \tag{8.37}$$

Le vecteur flux s'exprime

$$\boldsymbol{F}_d(\boldsymbol{q}) = v\boldsymbol{q} , \tag{8.38}$$

où v est la vitesse des particules. La résolution numérique de ce système dans le cadre de la méthode des volumes finis consiste de nouveau à résoudre un problème de Riemann, défini comme l'association du système (8.37) avec une condition initiale discontinue du type

$$\boldsymbol{q}(x,0) = \boldsymbol{q}_0(x) = \begin{cases} \boldsymbol{q}_L & \text{si} \quad x < 0 \\ \boldsymbol{q}_R & \text{si} \quad x > 0 \end{cases} . \tag{8.39}$$

La solution du problème de Riemann dépend de la configuration des ondes émises à l'interface et qui sont associées à l'unique valeur propre du système, à savoir la vitesse v des particules. Plusieurs configurations sont ainsi à distinguer selon les valeurs de la vitesse à gauche et à droite de l'interface :

- $v_R > v_L > 0$ ou $v_L > v_R > 0$ (schémas (c) et (f) de la Figure 8.5). Ce sont les particules venant de la gauche qui franchissent l'interface et par conséquent le flux numérique est donné par

$$\phi_d(\boldsymbol{q}_L, \boldsymbol{q}_R) = \boldsymbol{F}_d(\boldsymbol{q}_L) = v_L \boldsymbol{q}_L . \tag{8.40}$$

- $v_L < v_R < 0$ ou $v_R < v_L < 0$ (schémas (b) et (e)). Ce sont les particules venant de la droite qui franchissent l'interface, le flux numérique est donné par

$$\phi_d(\boldsymbol{q}_L, \boldsymbol{q}_R) = \boldsymbol{F}_d(\boldsymbol{q}_R) = v_R \boldsymbol{q}_R . \tag{8.41}$$

- $v_L < 0$ et $v_R > 0$ (schéma (a)). Les particules s'éloignent les unes des autres et l'interface est une zone de création de vide. Le flux numérique vaut alors simplement :

$$\phi_d(\boldsymbol{q}_L, \boldsymbol{q}_R) = 0 . \tag{8.42}$$

– $v_L > 0$ et $v_R < 0$ (schéma (d)). Les particules venant de gauche et de droite se dirigent les unes vers les autres. On est en présence d'un ***δ-choc*** et il est impossible de déterminer a priori quelles sont les particules qui franchissent l'interface. Une solution possible, implémentée dans le solveur SPIREE, consiste à évaluer le flux numérique comme la somme des flux venant de gauche et de droite [3] :

$$\phi_d\left(\boldsymbol{q}_L, \boldsymbol{q}_R\right) = \boldsymbol{F_d}\left(\boldsymbol{q}_L\right) + \boldsymbol{F_d}\left(\boldsymbol{q}_R\right) = v_L \boldsymbol{q}_L + v_R \boldsymbol{q}_R \,. \tag{8.43}$$

Une formulation compacte du flux numérique ϕ_d, qui n'est autre que le flux physique solution du problème de Riemann, s'écrit finalement

$$\boxed{\phi_d\left(\boldsymbol{q}_L, \boldsymbol{q}_R\right) = \frac{v_L + |v_L|}{2}\boldsymbol{q}_L + \frac{v_R - |v_R|}{2}\boldsymbol{q}_R \,.} \tag{8.44}$$

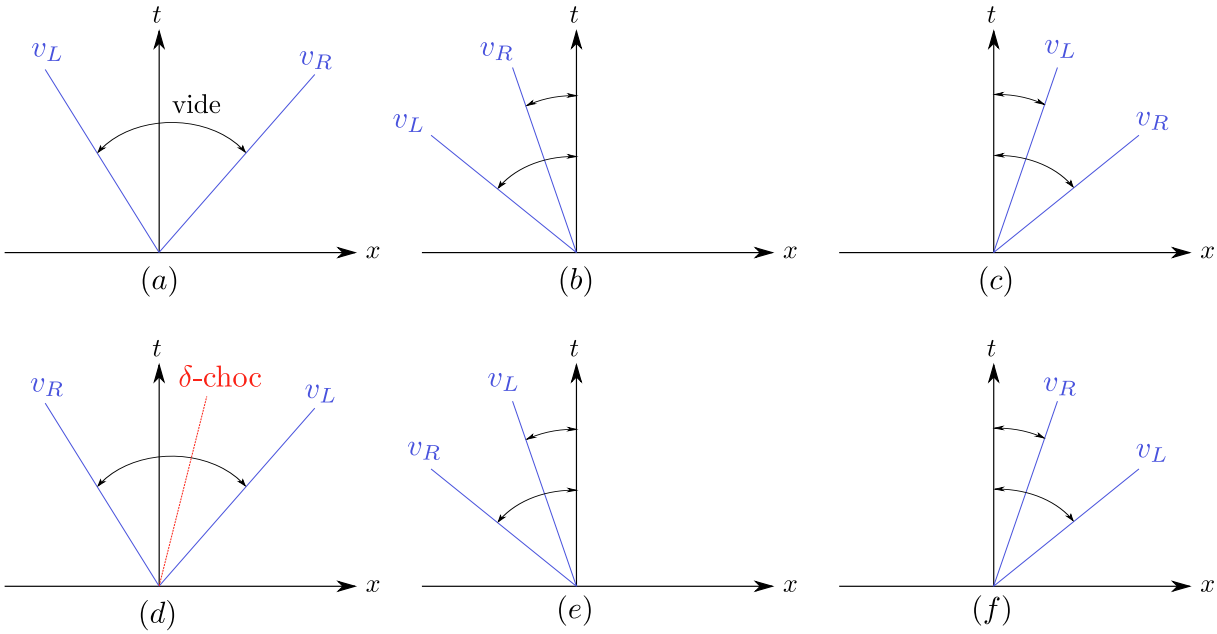


FIGURE 8.5 – ***Combinaisons possibles de la solution du problème de Riemann pour les équations de la phase dispersée.***

Pour conclure, notons que si $\boldsymbol{q}_L$ et $\boldsymbol{q}_R$ sont évalués à partir des états aux centres des cellules, alors le schéma de Godunov n'est précis qu'à l'ordre 1. Afin d'obtenir une précision d'ordre 2, on utilise l'approche MUSCL présentée au paragraphe suivant.

8.3 Méthode MUSCL pour la discrétisation spatiale d'ordre 2

Nous avons présenté en § 8.2.1 et § 8.2.3 les schémas de flux numériques utilisés pour approximer les flux convectifs dans les équations du fluide et de la phase dispersée. Dans la formulation (8.11) des systèmes d'équations en volumes finis, nous avons écrit que les arguments de ces flux numériques étaient les états aux centres des cellules de part et d'autre de l'interface. Dans ce cas, la discrétisation spatiale n'est que d'ordre 1. Pour permettre une discrétisation spatiale d'ordre 2, la ***méthode MUSCL*** est utilisée dans CEDRE. Cette technique, proposée initialement par van LEER [278], consiste à remplacer dans l'expression des flux numériques les valeurs aux centres des cellules par des valeurs reconstruites aux faces. Si l'on note $\boldsymbol{Q}_{ij}$ et $\boldsymbol{Q}_{ji}$, ainsi que $\boldsymbol{q}_{ij}$ et $\boldsymbol{q}_{ji}$, les valeurs reconstruites de part et d'autre d'une face S_{ij}, alors les schémas volumes finis utilisant la technique MUSCL, pour le

3. A noter qu'une amélioration dans le traitement des δ-chocs a été proposée par BOUCHUT et al. [26]. Elle consiste à calculer la vitesse du δ-choc comme $v_\delta = \left(\sqrt{\rho_L} v_L + \sqrt{\rho_R} v_R\right) / \left(\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}\right)$, puis à décentrer le flux du côté gauche ou du côté droit selon le signe de v_δ.

fluide et la phase dispersée, s'écrivent

$$\left\{\begin{array}{lcl} \dfrac{\partial \boldsymbol{Q}_i}{\partial t} + \displaystyle\sum_{j\in\mathcal{V}(i)} \frac{|S_{ij}|}{|K_i|}\Big[\phi_C\left(\boldsymbol{Q}_{ij},\boldsymbol{Q}_{ji},\boldsymbol{n}_{ij}\right) - \phi_D\left(\boldsymbol{Q}_i,\boldsymbol{Q}_j,\boldsymbol{n}_{ij}\right)\Big] & = & \boldsymbol{S}\left(\boldsymbol{Q}_i\right) \\ \dfrac{\partial \boldsymbol{q}_i}{\partial t} + \displaystyle\sum_{j\in\mathcal{V}(i)} \frac{|S_{ij}|}{|K_i|}\phi_d\left(\boldsymbol{q}_{ij},\boldsymbol{q}_{ji},\boldsymbol{n}_{ij}\right) & = & \boldsymbol{S_d}\left(\boldsymbol{q}_i\right) \end{array}\right. . \tag{8.45}$$

La méthode MUSCL réduit la dissipation numérique et permet en théorie d'obtenir une précision d'ordre 2. Elle présente l'avantage d'être assez simple à mettre en œuvre dans un code volumes finis, puisqu'il n'est pas nécessaire de changer l'expression des flux numériques mais seulement leurs arguments. Malgré cette apparente simplicité, les reconstructions aux faces doivent respecter certaines conditions pour garantir la stabilité des schémas, et pour cela il est nécessaire d'avoir recours à des procédures de limitation. Dans le cas des maillages non structurés généraux, obtenir des reconstructions aux faces qui garantissent la stabilité des schémas sans dégrader leur précision est une tâche particulièrement délicate. Les paragraphes suivants présentent la méthodologie adoptée historiquement dans CEDRE pour le calcul des reconstructions aux faces.

8.3.1 Procédures d'interpolations dans CEDRE

Les procédures d'interpolation étant communes aux solveurs CHARME et SPIREE, elles sont présentées ici pour une variable quelconque notée U. Nous préciserons en § 8.3.3 quelles sont les variables effectivement interpolées dans chaque solveur. Dans le cadre de la technique MUSCL en maillage non structuré général, un certain nombre d'approches peuvent être envisagées pour calculer les reconstructions aux faces. Elles dépendent principalement des deux points suivants :

1. comment est évaluée la dérivée de la variable U dans la direction portée par le vecteur $\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{M}_{ij}$ (centre de cellule - centre de face). Deux approches différentes peuvent être distinguées : la catégorie des méthodes ***monoslope*** (ou ***monopentes***), et celle des méthodes ***multislope*** (ou ***multipentes***). Dans le premier cas, un unique gradient (grandeur vectorielle) est calculé dans chaque maille et sert à calculer les interpolations sur toutes les faces de la cellule. Dans le second cas, on s'attache à déterminer des pentes (grandeurs scalaires) dédiées à chaque face de la cellule.
2. comment sont limités le gradient ou les pentes afin de garantir la stabilité du schéma. En effet, d'après le ***théorème de Godunov***, un schéma numérique à la fois linéaire et monotone (qui ne génère pas de nouveaux extrema) ne peut être que d'ordre 1. Par conséquent, un schéma d'ordre 2 doit nécessairement utiliser des reconstructions ***non linéaires*** pour être stable. Cela signifie que les gradients ou les pentes qui servent à calculer les reconstructions doivent être limités ***de manière plus ou moins prononcée selon la régularité de la solution***.

Dans CEDRE, l'approche historiquement utilisée est celle des techniques de type ***monopente***. Un gradient unique est calculé dans chaque cellule et des algorithmes de limitation sont ensuite appliqués. Si l'on considère la cellule K_i et l'une de ses faces S_{ij}, alors la reconstruction "brute" au point $\boldsymbol{M}_{ij}$, barycentre de la face S_{ij}, serait simplement obtenue par

$$U_{ij} = U_i + (\nabla U)_i \cdot \boldsymbol{B}_i\boldsymbol{M}_{ij}\,, \tag{8.46}$$

où $(\nabla U)_i$ représente une certaine évaluation du gradient "brut" au point $\boldsymbol{B}_i$, barycentre de la maille K_i. En maillage non structuré général, plusieurs formules de calcul des gradients de maille peuvent être utilisées, notamment celle de Green ou des moindres carrés (LETERRIER [177]). Par défaut, le calcul du gradient intègre uniquement le voisinage par faces de la cellule, mais les gradients peuvent également être ***lissés***, c'est-à-dire calculés en intégrant un voisinage de la cellule plus étendu.

A partir de là, l'objectif d'une procédure de limitation est de fournir un gradient limité $\widetilde{(\nabla U)}_i$ se substituant au gradient brut $(\nabla U)_i$ dans la relation (8.46), de telle sorte que les reconstructions U_{ij} qui en découlent garantissent la stabilité du schéma, et tout en conservant, lorsque cela est possible, une précision d'ordre 2.

8.3.2 Algorithmes de limitation des gradients de maille

Les procédures classiques de limitation des gradients ont été établies dans le cadre simplifié d'une loi de conservation scalaire du type

$$\partial_t u + \boldsymbol{\nabla}\cdot f(u) = 0\,, \tag{8.47}$$

dont la discrétisation en volumes finis avec un schéma d'Euler explicite en temps (mais a priori d'ordre 2 en espace) s'écrit

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \Delta t \sum_{j \in \mathcal{V}(i)} \frac{|S_{ij}|}{|K_i|} \phi_{ij}\left(U_{ij}, U_{ji}\right) . \tag{8.48}$$

Les notations sont les mêmes que celles introduites au paragraphe § 8.1, et ϕ_{ij} désigne donc la fonction flux numérique approximant le flux $f(u)$ à travers l'interface S_{ij}. Les reconstructions U_{ij} sont donc calculées par la relation

$$U_{ij} = U_i + \widetilde{(\nabla U)}_i \cdot \boldsymbol{B}_i \boldsymbol{M}_{ij} , \tag{8.49}$$

où le gradient limité $\widetilde{(\nabla U)}_i$ est le résultat d'une procédure de limitation dont le but est de garantir le principe du maximum local (PML) :

$$\boxed{\forall\ K_i \in \Omega, \qquad \min_{K_j \in \overline{\mathcal{U}_i}} U_j^n \ \leq\ U_i^{n+1} \ \leq \max_{K_j \in \overline{\mathcal{U}_i}} U_j^n , \qquad \overline{\mathcal{U}_i} = \mathcal{U}(K_i) \cup \{K_i\} .} \tag{8.50}$$

Ainsi, le schéma (8.48) respecte le PML si la valeur actualisée de la variable U au temps t^{n+1} est bornée par les valeurs minimale et maximale au temps t^n, dans un certain voisinage $\mathcal{U}(K_i)$ qui peut être d'étendue quelconque. A noter que le PML sera également utilisé dans le cadre de la nouvelle méthode MUSCL multipente (voir la Définition 1 du Chapitre 9).

Limitation non directionnelle

La limitation non directionnelle consiste à multiplier toutes les composantes du gradient brut $(\nabla U)_i$ par un unique coefficient de limitation α_i tel que

$$0 \leq \alpha_i \leq 1 . \tag{8.51}$$

L'objectif est de rendre monotones les interpolations aux faces, c'est-à-dire obtenir

$$U^{min} \leq U_{ij} \leq U^{max} , \tag{8.52}$$

avec

$$U^{min} = \min_{k \in \mathcal{V}(ij)} U_k , \qquad U^{max} = \max_{k \in \mathcal{V}(ij)} U_k , \qquad \mathcal{V}(ij) = \mathcal{V}(i) \cup \mathcal{V}(j) , \tag{8.53}$$

U^{min} et U^{max} désignant donc les valeurs minimale et maximale de la variable U dans l'ensemble $\mathcal{V}(ij)$, union des voisinages par faces des cellules K_i et K_j. En effet, on peut démontrer dans ce cas que le schéma volumes finis (8.48), associé aux reconstructions (8.49), respecte le PML (8.50) (BARTH et OHLBERGER [14]). Deux méthodes issues de la référence BARTH et OHLBERGER [14] sont disponibles dans CEDRE pour calculer le coefficient α_i. La première option, nommée "Type Van Leer" dans CEDRE, exprime le coefficient α_i comme

$$\alpha_i^{VL} = \min_{j \in \mathcal{V}(i)} \begin{cases} \dfrac{U^{max} - U_i}{(\nabla U)_i \cdot \boldsymbol{B}_i \boldsymbol{M}_{ij}} & \text{si} \quad (\nabla U)_i \cdot \boldsymbol{B}_i \boldsymbol{M}_{ij} > U^{max} - U_i \\ \dfrac{U^{min} - U_i}{(\nabla U)_i \cdot \boldsymbol{B}_i \boldsymbol{M}_{ij}} & \text{si} \quad (\nabla U)_i \cdot \boldsymbol{B}_i \boldsymbol{M}_{ij} < U^{min} - U_i \\ 1 & \text{sinon} \end{cases} . \tag{8.54}$$

La seconde option, nommée "Type Minmod" dans CEDRE, exprime α_i comme

$$\alpha_i^{MM} = \min_{j \in \mathcal{V}(i)} \begin{cases} \dfrac{\max\left(U_i, U_j\right) - U_i}{(\nabla U)_i \cdot \boldsymbol{B}_i \boldsymbol{M}_{ij}} & \text{si} \quad (\nabla U)_i \cdot \boldsymbol{B}_i \boldsymbol{M}_{ij} > \max\left(U_i, U_j\right) - U_i \\ \dfrac{\min\left(U_i, U_j\right) - U_i}{(\nabla U)_i \cdot \boldsymbol{B}_i \boldsymbol{M}_{ij}} & \text{si} \quad (\nabla U)_i \cdot \boldsymbol{B}_i \boldsymbol{M}_{ij} < \min\left(U_i, U_j\right) - U_i \\ 1 & \text{sinon} \end{cases} . \tag{8.55}$$

La seconde méthode est plus dissipative que la première puisque la monotonie est imposée par rapport aux valeurs de chaque côté des interfaces et non pas simplement par rapport aux valeurs minimale et maximale de l'ensemble du voisinage. Le gradient limité à utiliser dans le calcul des interpolations (relation (8.49)) s'obtient finalement par la relation

$$\boxed{\widetilde{(\nabla U)}_i = \alpha_i \, (\nabla U)_i ,} \tag{8.56}$$

où $(\nabla U)_i$ est le gradient brut.

Limitation directionnelle

Les procédures de limitation non directionnelle peuvent se révéler très dissipatives. En effet, toutes les composantes du gradient sont affectées par la limitation, même lorsque le gradient n'est important que dans une seule direction. C'est pourquoi des procédures de limitation directionnelle ont été développées dans la littérature (BERGER et al. [19], HUBBARD [142], O'ROURKE et SAHOTA [205]). L'objectif est d'opérer le minimum de limitation nécessaire afin de réduire la dissipation numérique, tout en préservant évidemment la stabilité. Les méthodes directionnelles sont cependant plus complexes à mettre en œuvre, peuvent engendrer un coût de calcul supplémentaire non négligeable, et par ailleurs ne pas être forcément bien adaptées au calcul parallèle.

La méthode directionnelle implémentée dans CEDRE a été développée dans la thèse de HAIDER [130]. Elle est inspirée des travaux cités ci-dessus tout en intégrant un certain nombre de modifications, notamment pour la rendre plus facilement compatible avec le calcul parallèle. Dans les faits, la limitation directionnelle de CEDRE réduit effectivement la diffusion numérique de manière significative en comparaison des méthodes non directionnelles. Cependant, elle souffre de problèmes de robustesse lorsqu'elle est utilisée dans des cas exigeants. C'est typiquement le cas des simulations d'écoulements diphasiques, où les forts rapports de densité ne permettent pas, en général, de mener à bien des simulations à l'ordre 2.

Cette constatation a justifié le développement d'une nouvelle méthode de discrétisation spatiale d'ordre 2 dans CEDRE, qui soit à la fois précise et robuste pour les cas diphasiques. Il s'agit d'une ***méthode MUSCL multipente pour maillages non structurés généraux***. Elle a été développée dans le cadre de cette étude, et sera présentée spécifiquement au Chapitre 9. Par ailleurs, cette méthode a fait l'objet de la publication LE TOUZE et al. [169], et elle est désormais intégrée aux solveurs eulériens CHARME et SPIREE du code CEDRE.

Pour conclure, il est à noter que de nouvelles techniques de limitation directionnelle en approche monopente ont été développées assez récemment, notamment par PARK et al. [212] et BUFFARD et CLAIN [29]. Il serait intéressant de les tester dans CEDRE et de les comparer à la méthode multipente du Chapitre 9.

8.3.3 Choix des variables interpolées

Nous venons de présenter les procédures de limitation classiques de CEDRE pour une variable quelconque, et dans le cadre d'une simple équation de conservation scalaire. En réalité, nous avons à traiter des systèmes d'équations, et la question se pose donc du choix des variables à interpoler. En effet, chaque système est associé à un jeu de variables conservatives, regroupées dans le vecteur $\boldsymbol{Q}$ pour le fluide et dans le vecteur $\boldsymbol{Q}_d^{(k)}$ (noté $\boldsymbol{q}$ dans ce chapitre) pour la phase dispersée. Ces variables conservatives sont elles-mêmes reliées à des variables primitives (ou naturelles) par l'intermédiaire de changements de variables utilisant par exemple des lois d'état thermodynamiques (cf. Chapitre 5 et Chapitre 6).

Dans la pratique, il est préférable de reconstruire les variables primitives et non pas les variables conservatives. Cela permet notamment de garantir la positivité de la pression et de la température. Cependant, il faut garder à l'esprit que contrairement au cas scalaire, les variables des systèmes d'équations qui nous intéressent, mêmes primitives, n'ont généralement pas à respecter de principe du maximum [4]. Les quantités conservées nécessaires au calcul des flux numériques sont alors recalculées à partir des variables primitives reconstruites. Ainsi, on reconstruit dans CHARME le vecteur $\boldsymbol{U}$ (cf. (5.25) au Chapitre 5), à savoir la pression, la température, la vitesse et les fractions massiques. Dans SPIREE, on reconstruit le vecteur $\boldsymbol{U}_d{}^{(k)}$ (cf. (6.3) au Chapitre 6), à savoir le diamètre, la vitesse, la température et la fraction volumique.

8.4 Intégration temporelle

Les schémas volumes finis écrits en (8.11) (discrétisation spatiale d'ordre 1) ou en (8.45) (discrétisation spatiale d'ordre 2), sont seulement des schémas semi-discrétisés. Il reste à proposer une stratégie numérique d'intégration temporelle, permettant de déterminer les états actualisés à l'instant t^{n+1} à partir des états au temps t^n. Plusieurs approches peuvent être envisagées, selon que l'on considère une intégration globale de tous les termes des équations

4. Plus précisément, aucune des variables primitives du système des équations d'Euler (pression, vitesse, densité) n'a à respecter de principe du maximum. En revanche, il existe un principe du maximum pour la vitesse dans le cas du système des équations de la phase dispersée sans termes sources (c'est-à-dire pour la partie convective équivalente au système des gaz sans pression).

ou au contraire une intégration découplée des différents phénomènes physiques (transport et termes sources). Cette dernière vision, dite à ***splitting d'opérateurs***, est celle que nous adoptons dans cette étude.

8.4.1 Splitting d'opérateurs

Intérêt et justification des méthodes de splitting

Historiquement, la philosophie du code CEDRE est celle d'une intégration globale des systèmes d'équations, c'est-à-dire une intégration simultanée des flux et des termes sources. Cependant, il a été démontré que cette approche n'est généralement pas la mieux adaptée pour les simulations d'écoulements diphasiques avec fort couplage entre les phases (DOISNEAU [71], DOISNEAU et al. [70]). En particulier, la robustesse de cette approche est mise en défaut lorsque les termes sources sont raides, comme cela se produit en présence de petites gouttes dont les temps de relaxation sont très courts. Des difficultés surviennent également lorsque la concentration des particules est importante, à la limite de validité de l'hypothèse de phase dispersée, ce qui implique une forte rétroaction de la phase dispersée sur la phase gazeuse. Dans ces configurations exigeantes, il s'avère qu'une intégration découplée des opérateurs de transport et des termes sources de couplage est plus robuste, permettant ainsi l'utilisation de pas de temps plus élevés et adaptés à chaque opérateur, et donc des coûts de simulation moindres. La mise en place et l'analyse des méthodes de splitting d'opérateurs disponibles dans CEDRE sont décrites dans les publications DOISNEAU et al. [70] et SIBRA et al. [252], ainsi que dans les thèses de DOISNEAU [71] et SIBRA [251]. Ces références proposent également diverses applications des méthodes de splitting à des simulations d'écoulements diphasiques fortement couplés.

Les méthodes de splitting consistent à décomposer le système global en plusieurs sous-systèmes, chacun correspondant à une physique particulière du problème. Ces sous-systèmes sont intégrés successivement, ce qui autorise l'utilisation de méthodes numériques et de pas de temps bien adaptés à chaque sous-problème. Cependant, cette stratégie introduit une erreur de splitting (ou erreur de découplage), dont l'importance doit être évaluée avec attention. Elle est généralement acceptable tant que le pas de temps de splitting est inférieur aux plus petites échelles de temps caractéristiques du problème.

Décomposition en sous-systèmes

Si l'on reprend les formulations vectorielles des systèmes d'équations (cf. § 5.1.4 pour le fluide et § 6.2 pour une section de la phase dispersée), et que l'on utilise les formes décomposées des vecteurs termes sources, on obtient la formulation suivante de chaque système :

$$\left\{\begin{array}{lcl} \dfrac{\partial \boldsymbol{Q}}{\partial t} + \nabla.\,(\boldsymbol{F_C} - \boldsymbol{F_D}) &=& \boldsymbol{S_{FD}} + \boldsymbol{S_G} + \boldsymbol{S_\omega} \\ \dfrac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial t} + \nabla.\,\boldsymbol{F_d} &=& \boldsymbol{S_\Gamma} + \boldsymbol{S_{sec}} + \boldsymbol{S_g} + \boldsymbol{S_{vap}} + \boldsymbol{S_\mathcal{P}} + \boldsymbol{S_{drag}} + \boldsymbol{S_\Phi} \end{array}\right. , \tag{8.57}$$

en rappelant que l'on a fait le choix d'omettre l'exposant (k) et de noter $\boldsymbol{Q}_d^{(k)} = \boldsymbol{q}$ dans ce chapitre. Le système d'équations du fluide est alors décomposé en deux sous-systèmes, tandis que le système d'équations pour une section de la phase dispersée est décomposé en quatre sous-systèmes. A chacun de ces sous-systèmes est associé un opérateur d'intégration temporelle qui permet d'obtenir une actualisation intermédiaire des variables. On distingue trois types d'opérateurs, qui correspondent aux trois cadres respectivement référencés en (8.58), (8.59) et (8.60) :

- l'opérateur d'intégration $\mathcal{H}_{TF}$ propre au fluide, regroupant les flux convectifs et diffusifs, ainsi que les termes sources de réactions chimiques et de gravité.
- les opérateurs propres à la phase dispersée, en l'occurrence l'opérateur $\mathcal{H}_{TD}$ qui contient le transport et les termes sources de gravité, et l'opérateur $\mathcal{H}_\Gamma$ qui regroupe les termes sources de fragmentation secondaire.
- les opérateurs contenant des termes sources de couplage entre le fluide et la phase dispersée, en l'occurrence les opérateurs $\mathcal{H}_\mathcal{P}$ (couplage phase dispersée - phase liquide du fluide) et $\mathcal{H}_{SRST}$ (couplage phase dispersée - phase gazeuse du fluide) du point de vue de SPIREE, et l'opérateur équivalent $\mathcal{H}_{FD}$ qui regroupe les mêmes termes sources du point de vue de CHARME.

$$\underbrace{\frac{\partial \boldsymbol{Q}}{\partial t} + \nabla.\,(\boldsymbol{F_C} - \boldsymbol{F_D}) = \boldsymbol{S_G} + \boldsymbol{S_\omega}}_{\mathcal{H}_{TF}} \tag{8.58}$$

$$\underbrace{\frac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial t} + \nabla.\,\boldsymbol{F_d} = \boldsymbol{S_g}}_{\mathcal{H}_{TD}} \qquad \underbrace{\frac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial t} = \boldsymbol{S_\Gamma}}_{\mathcal{H}_\Gamma} \tag{8.59}$$

$$\boxed{\begin{array}{l} \underbrace{\dfrac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial t} = \boldsymbol{S}_{sec} + \boldsymbol{S}_{vap} + \boldsymbol{S}_{drag} + \boldsymbol{S}_{\Phi}}_{\mathcal{H}_{SRST}} \qquad \underbrace{\dfrac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial t} = \boldsymbol{S}_{\mathcal{P}}}_{\mathcal{H}_{\mathcal{P}}} \qquad \underbrace{\dfrac{\partial \boldsymbol{Q}}{\partial t} = \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{FD}}}_{\mathcal{H}_{FD}} \end{array}} \tag{8.60}$$

L'actualisation finale des variables du fluide et de la phase dispersée à l'issue d'un pas de temps de splitting complet est obtenue par application successive des différents opérateurs. Il reste cependant à choisir l'ordre d'intégration des opérateurs.

Intégration des opérateurs

Parmi les différentes méthodes de splitting qui ont été développées dans la littérature, les schémas de Lie et de Strang sont probablement les deux exemples les plus connus. Dans le splitting de Lie, les termes sources sont évalués une seule fois après l'opérateur de transport, et intégrés sur la durée du pas de temps de splitting (TROTTER [269]). Dans le splitting de Strang, les termes sources sont évalués une première fois avant l'opérateur de transport, intégrés sur un demi pas de temps de splitting, puis évalués une seconde fois après le transport, et de nouveau intégrés sur un demi pas de temps de splitting (STRANG [262]).

Le schéma de Strang est donc plus coûteux puisqu'il nécessite une double évaluation des termes sources. En revanche, il est d'ordre 2 sur l'erreur de splitting quand le schéma de Lie n'est que d'ordre 1. Des méthodes de splitting d'ordre plus élevé ont également été développées dans la littérature. Néanmoins, seuls les schémas de Lie et de Strang sont implémentés dans CEDRE. Le schéma de Lie est bien souvent suffisant, c'est d'ailleurs celui que nous utiliserons pour la simulation numérique du banc Mascotte au Chapitre 11. Enfin, l'ordre d'intégration des opérateurs a également une influence sur l'erreur de splitting. Il a été démontré que les opérateurs liés aux temps caractéristiques les plus rapides devaient être intégrés en dernier (DESCOMBES et MASSOT [60], DUARTE [75]).

Si l'on applique le schéma de splitting de Lie à notre cas, cela conduit à écrire l'avancement en temps des deux systèmes sous la forme suivante :

$$\boxed{\left\{ \begin{array}{lcl} \boldsymbol{Q}^{n+1} & = & \left[\mathcal{H}_{FD}\mathcal{H}_{TF}\right]^{\Delta t} \boldsymbol{Q}^{n} \\ \boldsymbol{q}^{n+1} & = & \left[\mathcal{H}_{\mathcal{P}}\mathcal{H}_{SRST}\mathcal{H}_{\Gamma}\mathcal{H}_{TD}\right]^{\Delta t} \boldsymbol{q}^{n} \end{array} \right.} \tag{8.61}$$

Dans cette formulation, l'opérateur qui est exécuté en premier est celui situé le plus à droite. Le même choix d'ordonnancement des opérateurs dans le cadre du schéma de splitting de Strang donnerait :

$$\boxed{\left\{ \begin{array}{lcl} \boldsymbol{Q}^{n+1} & = & \mathcal{H}_{FD}^{\Delta t/2}\mathcal{H}_{TF}^{\Delta t}\mathcal{H}_{FD}^{\Delta t/2}\boldsymbol{Q}^{n} \\ \boldsymbol{q}^{n+1} & = & \left[\mathcal{H}_{\mathcal{P}}\mathcal{H}_{SRST}\mathcal{H}_{\Gamma}\right]^{\Delta t/2} \mathcal{H}_{TD}^{\Delta t} \left[\mathcal{H}_{\mathcal{P}}\mathcal{H}_{SRST}\mathcal{H}_{\Gamma}\right]^{\Delta t/2} \boldsymbol{q}^{n} \end{array} \right.} \tag{8.62}$$

Dans ces deux relations, l'exposant Δt ou $\Delta t/2$ accolé à un opérateur indique que celui-ci est intégré sur une durée égale au pas de temps de splitting, ou bien sur une durée égale à la moitié du pas de temps de splitting.

8.4.2 Schémas d'avancement en temps

Afin de conclure la présentation des méthodes numériques de résolution, il reste à définir les schémas d'avancement en temps utilisés au sein des différents opérateurs introduits précédemment. Il est important de noter que sous l'effet de la discrétisation spatiale, les systèmes d'équations aux dérivées partielles (EDP) deviennent des systèmes d'équations différentielles ordinaires (EDO), où la seule variable restante est la variable temps, et pour lesquelles de nombreuses méthodes numériques de résolution existent. Le code CEDRE dispose ainsi d'un certain nombre de schémas, explicites ou implicites. La majorité de ces schémas peut être formulée selon le formalisme générique des méthodes itératives de Runge-Kutta (BUTCHER [31–33]), c'est-à-dire des méthodes à ***un seul pas***, mais éventuellement à plusieurs ***étapes*** [5].

5. Une méthode à un pas ne requiert le stockage des variables qu'au seul instant t^n, même si éventuellement plusieurs étapes intermédiaires sont nécessaires afin d'obtenir l'instant suivant t^{n+1}. Une méthode à plusieurs pas nécessite en revanche le stockage de plusieurs instants précédents, par exemple t^n et t^{n-1} pour une méthode à deux pas.

Formulation générique des méthodes itératives de Runge-Kutta à un pas

Pour commencer, il est pratique d'adopter une notation générique englobant tous les sous-systèmes définis par les relations (8.58) et (8.59). Ainsi, chaque sous-système peut être écrit sous la forme

$$\frac{\partial \boldsymbol{Q}(t)}{\partial t} = \boldsymbol{F}\Big[\boldsymbol{Q}(t)\Big], \tag{8.63}$$

où $\boldsymbol{Q}$ peut désigner ici le vecteur des quantités conservées du fluide ou celui de la phase dispersée, et où $\boldsymbol{F}\Big[\boldsymbol{Q}(t)\Big]$ est l'***équation fonctionnelle***, que l'on désigne également par l'expression ***second membre***, et qui regroupe tous les termes autres que la dérivée temporelle dans chaque sous-système (flux, termes sources). Le formalisme de Runge-Kutta regroupe un ensemble de méthodes dédiées à la résolution numérique itérative d'équations différentielles ordinaires du type

$$\begin{cases} y'(t) &= f\left[t, y(t)\right] \\ y(t_0) &= y_0 \end{cases} . \tag{8.64}$$

Cependant, les lois de la physique sont généralement invariantes dans le temps. Par conséquent, elles sont décrites par des équations différentielles ***autonomes***, c'est-à-dire telles que la variable (ici le temps t) n'apparait pas dans l'équation fonctionnelle. C'est précisément le cas des systèmes d'équations qui nous intéressent, comme cela apparait dans la relation (8.63). Ainsi, la résolution discrète d'un système d'équations différentielles autonomes par une méthode de Runge-Kutta à plusieurs étapes s'écrit de manière générique comme

$$\boxed{\delta \boldsymbol{Q} \overset{\text{def}}{=} \frac{\boldsymbol{Q}^{n+1} - \boldsymbol{Q}^{n}}{\Delta t} = \sum_{i=1}^{s} b_i \boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{Q}_i\right)} , \tag{8.65}$$

où s désigne le nombre d'étapes de la méthode. A chaque étape i, une actualisation intermédiaire est opérée de la manière suivante :

$$\boxed{\boldsymbol{Q}_i = \boldsymbol{Q}^{n} + \Delta t \sum_{j=1}^{s} a_{ij} \boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{Q}_j\right), \quad 1 \leq i \leq s} . \tag{8.66}$$

Une méthode donnée est donc complètement définie par le nombre d'étapes s et les coefficients a_{ij} et b_i, ce que l'on peut représenter sous la forme d'un tableau, dit tableau de BUTCHER [31, 32] :

$$\boxed{\begin{array}{c|cccc} c_1 & a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1s} \\ c_2 & a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2s} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_s & a_{s1} & a_{s2} & \dots & a_{ss} \\ \hline & b_1 & b_2 & \dots & b_s \end{array}} , \tag{8.67}$$

où l'on a par définition :

$$\forall i, \quad c_i = \sum_{j=1}^{s} a_{ij} . \tag{8.68}$$

La valeur de c_i indique l'instant $t_i = t^n + \Delta t c_i$ pour lequel $\boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{Q}_i\right)$ est une bonne approximation de la dérivée $\partial \boldsymbol{Q}/\partial t$. Les coefficients c_i sont surtout utiles pour la résolution des équations différentielles non autonomes. La matrice $\left(a_{ij}\right)$ est appelée ***matrice de Runge-Kutta***, tandis que les coefficients b_i et c_i correspondent respectivement aux ***poids*** et aux ***noeuds*** de la méthode de quadrature utilisée pour calculer les temps intermédiaires des différentes étapes. Par ailleurs, dans le cas des méthodes explicites, la matrice de Runge-Kutta est strictement triangulaire inférieure, et donc le tableau de Butcher se simplifie en

$$\boxed{\begin{array}{c|ccccc} 0 & & & & & \\ c_2 & a_{21} & & & & \\ c_3 & a_{31} & a_{32} & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \\ c_s & a_{s1} & a_{s2} & \dots & a_{s,s-1} & \\ \hline & b_1 & b_2 & \dots & b_{s-1} & b_s \end{array}} . \tag{8.69}$$

Avec ces définitions, toute méthode qui entre dans le formalisme d'une méthode de Runge-Kutta peut être simplement définie par son tableau de Butcher. Quelques exemples classiques, disponibles dans CEDRE, sont donnés dans les paragraphes suivants.

θ-schémas à une étape Les θ-schémas à une étape ($s = 1$) sont une famille de schémas à un paramètre θ, dans lesquels l'avancement en temps s'exprime

$$\boxed{\delta \boldsymbol{Q} = \boldsymbol{F}\left[\theta \boldsymbol{Q}^{n+1} + (1-\theta)\,\boldsymbol{Q}^{n}\right].} \tag{8.70}$$

Leur tableau de Butcher est donné par

$$\boxed{\begin{array}{c|c} \theta & \theta \\ \hline & 1 \end{array}.} \tag{8.71}$$

Pour $\theta = 0$, il s'agit de la méthode d'***Euler explicite***, d'ordre 1 :

$$\boxed{\delta \boldsymbol{Q} = \boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{Q}^{n}\right).} \tag{8.72}$$

Pour $\theta = 1$, il s'agit de la méthode d'***Euler implicite*** (rétrograde), d'ordre 1 également :

$$\boxed{\delta \boldsymbol{Q} = \boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{Q}^{n+1}\right).} \tag{8.73}$$

Enfin, il s'agit pour $\theta = 1/2$ de la méthode de ***Gauss-Legendre***, théoriquement d'ordre 2, et équivalente au schéma de Crank-Nicolson si l'équation fonctionnelle est linéaire :

$$\boxed{\delta \boldsymbol{Q} = \boldsymbol{F}\left(\frac{\boldsymbol{Q}^{n} + \boldsymbol{Q}^{n+1}}{2}\right).} \tag{8.74}$$

θ-schémas explicites à deux étapes Les θ-schémas à deux étapes ($s = 2$) sont une famille de schémas explicites, d'ordre 2 et à un paramètre θ. Leur expression compacte est

$$\boxed{\delta \boldsymbol{Q} = \left(1 - \frac{1}{2\theta}\right)\boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{Q}^{n}\right) + \frac{1}{2\theta}\boldsymbol{F}\left[\boldsymbol{Q}^{n} + \Delta t\,\theta\,\boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{Q}^{n}\right)\right],} \tag{8.75}$$

et leur tableau de Butcher s'écrit

$$\boxed{\begin{array}{c|cc} 0 & & \\ \theta & \theta & \\ \hline & 1 - \frac{1}{2\theta} & \frac{1}{2\theta} \end{array}.} \tag{8.76}$$

Certains schémas connus appartiennent à cette catégorie. Pour $\theta = 1$, il s'agit de la ***méthode de Heun***, dont la méthode de quadrature définissant les temps intermédiaires de chaque étape repose sur la méthode des trapèzes. Pour $\theta = 1/2$, il s'agit du ***schéma prédicteur-correcteur explicite*** (souvent appelée ***méthode de Runge-Kutta d'ordre 2*** ou simplement ***RK2***), dont la méthode de quadrature définissant les temps intermédiaires est celle du point médian.

Les schémas explicites ont l'avantage d'être simples à implémenter dans un code. Leur exécution est également rapide en termes d'opérations machines à effectuer. En revanche, leur stabilité est conditionnée par un critère de type CFL (Courant-Friedrichs-Lewy). Ainsi, dans le cas des équations d'Euler, si l'on note ν le nombre CFL défini par

$$\nu = (|\boldsymbol{u}| + c)\,\frac{\Delta t}{\Delta x}, \tag{8.77}$$

où $\boldsymbol{u}$ et c désignent respectivement la vitesse convective et la vitesse du son, Δt et Δx étant les pas de temps et d'espace, alors le pas de temps Δt doit respecter :

$$\Delta t < \nu_{max} \frac{\Delta x}{|\boldsymbol{u}| + c} , \tag{8.78}$$

où ν_{max}, la valeur maximale admissible du nombre CFL, dépend de la limite de stabilité de chaque schéma. Elle est typiquement de $\nu_{max} \approx 0{,}5$ pour le schéma prédicteur-correcteur RK2. Cette contrainte de stabilité motive l'utilisation de schémas implicites, dont l'implémentation est plus complexe et l'exécution plus coûteuse, mais dont les zones de stabilité sont plus étendues. Des pas de temps plus élevés peuvent donc être utilisés, et le coût global des simulations s'en trouve réduit.

Schémas implicites à deux étapes RKI2 Les schémas RKI2 sont une famille de méthodes implicites à deux étapes et un paramètre θ. Ils ont été implémentés dans CEDRE dans le cadre de la thèse de BERTIER [21], et ils sont définis comme

$$\boxed{\begin{cases} \widetilde{\boldsymbol{Q}} &= \boldsymbol{Q}^n + \Delta t \left[(1-\theta)\, \boldsymbol{F}(\boldsymbol{Q}^n) + \theta \boldsymbol{F}\left(\widetilde{\boldsymbol{Q}}\right) \right] \\ \delta \boldsymbol{Q} &= (1/2-\theta)\, \boldsymbol{F}\left(\widetilde{\boldsymbol{Q}}\right) + (1/2+\theta)\, \boldsymbol{F}(\boldsymbol{Q}^n) + \theta \left[\boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{Q}^{n+1}\right) - \boldsymbol{F}(\boldsymbol{Q}^n) \right] \end{cases}} . \tag{8.79}$$

Ces schémas sont d'ordre 2 en temps. Ils sont donc bien adaptés aux calculs instationnaires, et pourront ainsi être utilisés lors de la simulation du banc Mascotte (cf. Chapitre 11). D'autres schémas implicites sont disponibles dans CEDRE, notamment le schéma de GEAR [105] à deux pas dont l'implémentation dans CEDRE est décrite dans la thèse de SAINTE-ROSE [236].

Le lien des schémas RKI2 avec le formalisme Runge-Kutta n'est pas clair, notamment quant à l'existence des coefficients du tableau de Butcher pour toutes les valeurs de θ. A minima, il est clair que l'on retrouve un schéma explicite pour $\theta = 0$, en l'occurrence la méthode de Heun. La valeur $\theta = 1/2$ correspond au schéma implicite de Crank-Nicolson, qui s'exprime

$$\boxed{\delta \boldsymbol{Q} = \frac{\boldsymbol{F}(\boldsymbol{Q}^n) + \boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{Q}^{n+1}\right)}{2} ,} \tag{8.80}$$

et dont le tableau de Butcher est donné par

$$\boxed{\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1/2 & 1/2 \\ \hline & 1/2 & 1/2 \end{array} .} \tag{8.81}$$

Pour $\theta = 1$, qui est la valeur par défaut dans CEDRE, le schéma RKI2 obtenu s'exprime sous la forme

$$\boxed{\begin{cases} \widetilde{\boldsymbol{Q}} &= \boldsymbol{Q}^n + \Delta t \boldsymbol{F}\left(\widetilde{\boldsymbol{Q}}\right) \\ \delta \boldsymbol{Q} &= \dfrac{\boldsymbol{F}(\boldsymbol{Q}^n) + \boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{Q}^{n+1}\right)}{2} + \dfrac{\boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{Q}^{n+1}\right) - \boldsymbol{F}\left(\widetilde{\boldsymbol{Q}}\right)}{2} \end{cases}} . \tag{8.82}$$

Il s'agit donc d'une combinaison entre le schéma de Crank-Nicolson et un terme obtenu à partir d'une première étape "Euler implicite". Il n'est pas évident que ce schéma puisse être exprimé dans le formalisme Runge-Kutta, et donc que l'on puisse définir les coefficients du tableau de Butcher.

Mise en œuvre pratique des schémas implicites dans CEDRE

En pratique, dans CEDRE comme dans la majorité des codes de calcul, la mise en œuvre des schémas implicites mobilise la procédure suivante (BERTIER [21]) :

1. ***linéarisation du second membre***. En effet, l'équation fonctionnelle est en général non linéaire, et donc la résolution du système implicite est facilitée si l'on procède à la linéarisation suivante (développement limité d'ordre 1) :

$$\boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{Q}^{n+1}\right) \approx \boldsymbol{F}(\boldsymbol{Q}^n) + \left.\frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial \boldsymbol{Q}}\right|^n \left(\boldsymbol{Q}^{n+1} - \boldsymbol{Q}^n\right) . \tag{8.83}$$

En introduisant la matrice jacobienne $\boldsymbol{J}$ telle que

$$\boldsymbol{J} = \frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial \boldsymbol{Q}} , \tag{8.84}$$

le θ-schéma linéarisé s'écrit ainsi

$$\boxed{(\boldsymbol{I} - \theta \Delta t \boldsymbol{J}^n)\, \delta \boldsymbol{Q} = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{Q}^n) \ ,} \tag{8.85}$$

où $\boldsymbol{I}$ est la matrice identité. De même, la famille de schémas RKI2 linéarisés s'écrit

$$\boxed{\left\{ \begin{array}{rcl} (\boldsymbol{I} - \theta \Delta t \boldsymbol{J}^n)\, \delta \widetilde{\boldsymbol{Q}} & = & \boldsymbol{F}(\boldsymbol{Q}^n) \\ (\boldsymbol{I} - \theta \Delta t \boldsymbol{J}^n)\, \delta \boldsymbol{Q} & = & (1/2 - \theta)\, \boldsymbol{F}\left(\widetilde{\boldsymbol{Q}}\right) + (1/2 + \theta)\, \boldsymbol{F}(\boldsymbol{Q}^n) \end{array} \right. .} \tag{8.86}$$

2. ***approximation du jacobien***. En toute rigueur, le calcul du jacobien devrait faire intervenir des cellules du second voisinage, dans la mesure où il inclut des dérivées secondes (certains termes appartenant au second membre des équations étant déjà des gradients). En pratique, il est bien moins coûteux d'utiliser un jacobien approché, n'utilisant par ailleurs que la reconstruction spatiale d'ordre 1. Il s'agit d'une approximation courante, malgré tout susceptible de dégrader la qualité de la solution. Aussi, une correction de ce jacobien approché est ajoutée ("defect correction").
3. ***résolution itérative du système linéaire***. Le système implicite rendu linéaire est finalement résolu par la méthode itérative GMRES (SAAD et SCHULTZ [234]).

Troisième partie

Développement de méthodes numériques et de modèles physiques

Chapitre 9

Développement d'une méthode MUSCL multipente adaptée aux maillages non structurés généraux

Ce chapitre présente une nouvelle méthode MUSCL multipente dédiée aux discrétisations en volumes finis sur maillages non structurés généraux, suivant l'approche "cell-center". L'essentiel de ces travaux a fait l'objet de l'article Le Touze *et al. [169], complété ici afin d'introduire quelques pistes de développement de la méthode. Les cas-tests présentés ne concernent pas directement la problématique de l'atomisation en combustion cryotechnique, cependant ils permettent de démontrer la robustesse et la précision de la méthode. Par ailleurs, ces travaux ont été essentiels à la mise en place de notre stratégie de couplage de modèles diphasiques avec le code CEDRE. En effet, nous avons évoqué au Chapitre 8 le fait que les méthodes de reconstruction MUSCL historiquement utilisées dans CEDRE pouvaient parfois souffrir de problèmes de robustesse, notamment lorsqu'elles étaient appliquées à des configurations d'écoulements diphasiques. La nouvelle méthode multipente a permis de résoudre ces problèmes de robustesse tout en offrant le plus souvent une précision supérieure aux méthodes monopentes classiques, comme illustré dans ce chapitre. Ainsi, elle a pu être utilisée lors de la simulation numérique du banc Mascotte, présentée au Chapitre 11, et elle est désormais intégrée aux solveurs CHARME et SPIREE du code CEDRE.*

Sommaire

9.1 Contexte général des méthodes MUSCL . . . 157
9.2 Présentation de la nouvelle méthode multipente . . . 158
9.2.1 Discrétisation en volumes finis des lois de conservation hyperboliques scalaires . . . 158
9.2.2 Nouvelle méthode multipente . . . 160
9.3 Construction des pentes . . . 160
9.3.1 Algorithme en 2D . . . 160
9.3.2 Algorithme en 3D . . . 161
9.4 Propriétés mathématiques de la reconstruction . . . 163
9.4.1 Précision d'ordre 2 . . . 163
9.4.2 Stabilité L^∞ . . . 165
9.5 Construction de limiteurs performants . . . 170
9.5.1 Limiteurs pivots dépendants du nombre CFL . . . 171
9.5.2 Génération d'un limiteur hybride . . . 171
9.6 Cas-tests numériques . . . 173
9.6.1 Traitement des conditions aux limites . . . 173
9.6.2 Cas-test de rotation 2D . . . 173
9.6.3 Cas-test 3D . . . 180
9.6.4 Cas-test de la marche dans un écoulement à Mach 3 . . . 182
9.6.5 Cas-test de jet liquide . . . 184
9.7 Conclusions et perspectives de développement . . . 186

9.1 Contexte général des méthodes MUSCL

Dans le domaine de la mécanique des fluides, la précision et la robustesse des méthodes numériques de résolution sont un enjeu fondamental. Ceci est particulièrement vrai en énergétique, où les écoulements peuvent être diphasiques, réactifs et turbulents, et ainsi présenter de forts gradients et des discontinuités, susceptibles de mettre à mal la robustesse des méthodes numériques. S'agissant de codes de calcul à vocation industrielle, il vient s'ajouter aux exigences de précision et de robustesse la contrainte de la simplicité de mise en œuvre et d'un coût des simulations qui doit rester abordable.

Dans ce contexte, depuis son introduction par van LEER [278], la méthode MUSCL est devenue une référence utilisée dans de nombreux codes volumes finis (GODLEWSKI et RAVIART [107], BARTH et OHLBERGER [14]), notamment à vocation industrielle. Il s'agit d'une extension de l'approche de GODUNOV [108] pour l'approximation des flux convectifs, permettant d'améliorer la précision des schémas numériques tout en préservant leur stabilité (van LEER [278], OSHER [209]). Malgré sa précision moindre comparée aux méthodes ENO, WENO ou Galerkin Discontinues, la méthode MUSCL reste bien moins coûteuse et plus simple à mettre en œuvre. C'est particulièrement vrai lorsqu'il s'agit de traiter des systèmes d'équations complexes sur des maillages non structurés tridimensionnels.

A l'origine, la méthode de van LEER [278] a été développée pour des équations de conservation scalaires et mono-dimensionnelles, résolues sur des maillages à pas constant. Le principe consiste à reconstruire de nouvelles approximations des variables aux faces à partir des valeurs aux centres des cellules, et à les utiliser comme arguments du flux numérique sans changer son expression (cf. § 8.3). La reconstruction sur une face est obtenue à partir d'une pondération de deux pentes, respectivement calculées en amont et en aval de la face. La pondération non linéaire de ces deux pentes utilise une ***fonction limiteur*** et vise à empêcher la survenue d'oscillations parasites dans la solution (SWEBY [265]). Plus précisément, la limitation est opérée de manière à respecter une propriété TVD (Total Variation Diminishing), qui garantit que la stabilité du schéma est préservée (HARTEN [132]).

L'extension de la méthode aux configurations multi-dimensionnelles a d'abord consisté à appliquer la procédure MUSCL dans chaque direction pour les maillages structurés (COLELLA [47]). Cependant, les travaux de GOODMAN et LEVEQUE [110] ont montré que, dans ce cas, le respect de la contrainte TVD ne pouvait conduire au mieux qu'à des schémas d'ordre 1. Cette limitation fût dépassée grâce à l'introduction des schémas à coefficients positifs (SPEKREIJSE [258]), et la notion de Principe du Maximum Local. La généralisation aux maillages non structurés est ensuite apportée par les schémas LED (Local Extremum Diminishing) développés par JAMESON [146]. Finalement, à l'heure actuelle, un certain nombre de méthodes MUSCL ont été développées pour traiter les maillages non structurés multi-dimensionnels. Il est possible de les classer selon la manière dont les pentes sont ***calculées***, d'une part, et ***limitées*** d'autre part (cf. § 8.3.1).

Il existe ainsi une première catégorie que l'on a qualifié de méthodes ***monopentes*** (ou ***monoslope***) au Chapitre 8. Dans ces approches, un unique gradient est utilisé pour calculer les reconstructions sur les différentes faces d'une cellule du maillage. Des algorithmes de limitation, directionnels ou non directionnels, sont ensuite appliqués pour garantir la stabilité du schéma (HUBBARD [142], BARTH et OHLBERGER [14]).

Par opposition à ces méthodes, une approche "face par face" a été introduite par STOUFFLET et al. [261] (voir aussi COURNÈDE et al. [50]) dans le contexte des méthodes volumes finis avec valeurs aux sommets ("cell-vertex"). Il s'agissait de déterminer des triangles amont et aval, permettant de calculer la reconstruction sur une face donnée à partir d'une pondération de pentes scalaires dédiées à cette face. On qualifie ainsi ces méthodes de ***multipentes*** (ou ***multislope***). Les méthodes multipentes ont été réétudiées récemment par BUFFARD et CLAIN [29] dans le contexte des méthodes volumes finis "cell-center", et par CALGARO et al. [34] dans le formalisme "cell-vertex". Des limiteurs de pentes classiques sont utilisés, bien que légèrement modifiés afin de tenir compte de l'hétérogénéité locale du maillage (CLAUZON [46]). L'approche multipente se révèle robuste et potentiellement plus précise que l'approche monopente (voir par exemple MURRONE et GUILLARD [202] pour une application à la simulation d'écoulements diphasiques présentant de forts rapports de densité).

Cependant, la technique introduite par BUFFARD et CLAIN [29] dans le contexte "cell-center" possède encore certaines limitations. Des hypothèses restrictives sont faites concernant la topologie acceptable des maillages. Ainsi, seuls les maillages triangulaires (2D) ou tétraédriques (3D) peuvent être traités, et par conséquent la méthode n'est pas capable de gérer les maillages non structurés généraux. Par ailleurs, BUFFARD et CLAIN [29] mettent en place deux versions de la méthode, selon le point où les reconstructions sont calculées sur la face. La version la plus précise est celle utilisant le barycentre des faces dans la mesure où elle conduit à la meilleure approximation du flux à travers la face lorsqu'un seul point est utilisé (point de Gauss). Malheureusement, la stabilité du schéma n'est pas garantie avec cette version (BUFFARD et CLAIN [29]).

La nouvelle méthode multipente développée dans ce chapitre s'inspire des travaux de BUFFARD et CLAIN [29], avec pour objectif de dépasser les deux limitations que l'on vient de décrire. On procède ainsi à une reconstruction des variables aux barycentres des faces, tout en respectant un principe du maximum. Par ailleurs, la méthode est libérée d'un maximum de contraintes sur la topologie ou la régularité du maillage. Ceci revêt une impor-

tance capitale pour nombre d'applications industrielles, qui utilisent des codes de calcul basés sur des maillages non structurés complètement généraux. C'est précisément le cas du code CEDRE de l'ONERA. L'utilisation de maillages polygonaux quelconques se rencontre également dans l'industrie pétrolière. La plateforme de développement logiciel ARCANE développée par le CEA et l'IFPEN (GROSPELLIER et LELANDAIS [117]) utilise ainsi des maillages 3D composés d'éléments polyédriques quelconques (tétraèdres, prismes, hexaèdres, octaèdres...).

La suite de ce chapitre est organisée de la manière suivante. Nous introduisons en § 9.2 le principe de la nouvelle méthode MUSCL multipente, dans le contexte des discrétisations en volumes finis des lois de conservation hyperboliques scalaires, sur maillages non structurés généraux et avec localisation des inconnues aux centres des cellules. Les paragraphes suivants décrivent les différentes étapes de la nouvelle procédure de reconstruction. Nous expliquons en § 9.3 les procédures de calcul des pentes, en 2D puis en 3D. Ensuite, les propriétés essentielles de consistance d'ordre 2 et de stabilité L^∞ sont démontrées en § 9.4. Le paragraphe § 9.5 est dédié à la construction de limiteurs bien adaptés et peu dissipatifs, potentiellement dépendants d'un critère CFL local. Enfin, une évaluation de la méthode sur un certain nombre de cas-tests est effectuée en § 9.6, et permet de démontrer son efficacité sur des maillages quelconques.

9.2 Présentation de la nouvelle méthode multipente

9.2.1 Discrétisation en volumes finis des lois de conservation hyperboliques scalaires

Afin d'introduire les schémas volumes finis utilisant la méthode MUSCL, nous considérons ici l'équation de conservation hyperbolique scalaire (9.1), munie des conditions initiales et aux limites (9.2). Considérons également le domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ (d désigne le nombre de dimensions de l'espace), dont la frontière est notée $\partial\Omega$, ainsi que $u(\boldsymbol{x}, t)$ et $\boldsymbol{F}[\boldsymbol{x}, t, u(\boldsymbol{x}, t)] = \boldsymbol{v}(\boldsymbol{x}, t)u(\boldsymbol{x}, t)$, fonctions respectivement à valeurs dans $\mathbb{R}$ et $\mathbb{R}^d$, avec $\boldsymbol{x} \in \Omega$, $t \in [0, T]$. La fonction $u_0(\boldsymbol{x})$ est la solution initiale du problème, tandis que $u_b(\boldsymbol{x} \in \partial\Omega^-(t), t)$ désigne la condition aux limites de Dirichlet. Il est à noter que la fonction de flux $\boldsymbol{F}$ dépend *a priori* de la position $\boldsymbol{x}$ et du temps t, en plus de la fonction scalaire u. Pour simplifier les notations, cette dépendance ne sera plus explicitement écrite dans la suite, où nous noterons le flux $\boldsymbol{F}(u)$ voire simplement $\boldsymbol{F}$ selon le contexte.

$$\partial_t u(\boldsymbol{x}, t) + \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{F}[\boldsymbol{x}, t, u(\boldsymbol{x}, t)] = 0 \,, \qquad \boldsymbol{x} \in \Omega \,, \qquad t \in]0, T[\,, \tag{9.1}$$

$$u(\boldsymbol{x}, t = 0) = u_0(\boldsymbol{x}) \,, \quad \boldsymbol{x} \in \Omega \,, \qquad u(\boldsymbol{x} \in \partial\Omega^-(t), t) = u_b(\boldsymbol{x} \in \partial\Omega^-(t), t) \,. \tag{9.2}$$

Dans la relation (9.2), $\partial\Omega^-(t)$ est tel que

$$\partial\Omega^-(t) = \{\boldsymbol{x} \in \partial\Omega \,|\, \boldsymbol{v}(\boldsymbol{x}, t) \cdot \boldsymbol{n}(\boldsymbol{x}) < 0\} \,, \tag{9.3}$$

où $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x}, t)$ et $\boldsymbol{n}(\boldsymbol{x})$ désignent respectivement le champ de vitesse et le vecteur normal à la frontière dirigé vers l'extérieur du domaine Ω. Supposons que le domaine Ω est polygonal (en 2D) ou polyédrique (en 3D). Nous introduisons alors un maillage du domaine Ω constitué d'un ensemble de polygones ou de polyèdres quelconques K_i, définis par un nombre quelconque de côtés ou de faces (cf. Figure 9.1 pour une configuration 2D). L'ensemble $\mathcal{V}(i)$ désigne le voisinage par faces de l'élément K_i, c'est-à-dire l'ensemble des éléments voisins K_j partageant avec K_i un côté ou une face, noté S_{ij}, et donc tel que $S_{ij} = K_i \cap K_j$. Par extension, $\mathcal{V}(i)$ pourra aussi faire référence à l'ensemble des indices j.

Détails sur les définitions des grandeurs géométriques associées à une cellule en 3D

Les définitions des grandeurs associées à une cellule polygonale en 2D, telles que la longueur et le centre des cotés, ou le barycentre de la cellule, ne posent pas de difficultés. Ce n'est pas forcément le cas pour une cellule polyédrique quelconque en 3D, où ces définitions ne sont pas univoques. Nous donnons donc ici quelques éléments concernant la définition dans CEDRE des grandeurs géométriques telles que l'aire et le barycentre des faces, ou encore le volume et le barycentre de la cellule. Pour plus de détails, le lecteur est invité à consulter les références COURBET et al. [49] et LETERRIER [177].

Toute face S_{ij} est définie par un nombre quelconque m_{ij} de sommets $\boldsymbol{P}_{ij,k}$, avec $k \in [1, m_{ij}]$. Ainsi, les faces ne sont pas forcément planaires. Toutefois, nous faisons l'hypothèse que chaque face S_{ij} est associée à un point géométrique $\boldsymbol{M}_{ij}$ tel que S_{ij} est une triangulation reposant sur le contour polygonal $\boldsymbol{P}_{ij,k}$, avec $k \in [1, m_{ij}]$, $\boldsymbol{M}_{ij}$ étant le point commun de cette triangulation. Le point $\boldsymbol{M}_{ij}$ est alors défini comme le centre de gravité de la face triangulée, selon la relation

$$\sum_{k=1}^{m_{ij}} |S_{ij,k}| \overrightarrow{\boldsymbol{M}_{ij}\boldsymbol{P}_{ij,k}} = \boldsymbol{0} \,, \tag{9.4}$$

où $|S_{ij,k}|$ est l'aire du triangle $\boldsymbol{M}_{ij}\boldsymbol{P}_{ij,k}\boldsymbol{P}_{ij,k+1}$. La relation (9.4) est une équation non-linéaire d'inconnue $\boldsymbol{M}_{ij}$, qui est résolue en pratique par quelques itérations de la méthode du point fixe. Dans la suite, nous noterons $|S_{ij}|$ l'aire de la face S_{ij}, calculée comme la somme des aires des triangles $\boldsymbol{M}_{ij}\boldsymbol{P}_{ij,k}\boldsymbol{P}_{ij,k+1}$. Le vecteur $\boldsymbol{n}_{ij}$, unitaire et normal à la face S_{ij}, et orienté de K_i vers K_j, est défini comme la somme des vecteurs unitaires normaux des triangles composant la face, pondérée par l'aire de ces triangles. Avec cette définition des faces des cellules en 3D, il est possible de définir de manière univoque le volume $|K_i|$ et le barycentre $\boldsymbol{B}_i$ de la cellule K_i par :

$$|K_i| = \int_{K_i} dV\,, \qquad \boldsymbol{B}_i = \frac{1}{|K_i|}\int_{K_i} \boldsymbol{X}\, dV\,. \tag{9.5}$$

Les relations suivantes sont alors approchées avec une précision d'ordre 2 :

$$\int_{K_i} u(\boldsymbol{x})\, dV \approx |K_i|\, u(\boldsymbol{B}_i)\,, \quad \int_{S_{ij}} u(\boldsymbol{x})\, dS \approx |S_{ij}|\, u(\boldsymbol{M}_{ij})\,. \tag{9.6}$$

Écriture du schéma volumes finis

Soit $(t^n)_{n\in[0,N]}$ une discrétisation du temps, et $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ le pas de temps. Nous avons adopté une formulation "cell-center", par conséquent U_i^n désigne la valeur de la fonction u au barycentre $\boldsymbol{B}_i$ de la cellule K_i, à l'instant t^n. En appliquant le théorème de la divergence et après intégration sur le volume de contrôle K_i, une formulation semi-discrète de l'équation de conservation (9.1) s'écrit (cf. Chapitre 8) :

$$|K_i|\frac{\partial U_i}{\partial t} + \sum_{j\in\mathcal{V}(i)} \int_{S_{ij}} \boldsymbol{F}\cdot\boldsymbol{n}_{ij}\, dS = 0\,. \tag{9.7}$$

On introduit ensuite la fonction de flux numérique $\phi_{ij}\left(U_i, U_j, \boldsymbol{n}_{ij}\right)$ dont le rôle est d'approximer l'intégrale du flux physique sur la face S_{ij} de la manière suivante :

$$\phi_{ij}\left(U_i, U_j, \boldsymbol{n}_{ij}\right)|S_{ij}| \simeq \int_{S_{ij}} \boldsymbol{F}\cdot\boldsymbol{n}_{ij}\, dS\,. \tag{9.8}$$

Le schéma volumes finis d'ordre 1 selon la méthode d'Euler explicite en temps s'écrit alors :

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \Delta t \sum_{j\in\mathcal{V}(i)} \frac{|S_{ij}|}{|K_i|}\,\phi_{ij}\left(U_i^n, U_j^n, \boldsymbol{n}_{ij}\right)\,. \tag{9.9}$$

Le flux numérique doit respecter certaines propriétés de manière à assurer la stabilité du schéma moyennant une condition CFL (GODLEWSKI et RAVIART [107]). En l'occurrence, ϕ_{ij} doit être une fonction C^1 monotone, consistante avec le flux physique (cf. § 9.4.2.1). Plusieurs fonctions de flux numérique peuvent être sélectionnées. Dans le domaine de l'énergétique, où l'on rencontre des discontinuités et de forts rapports de densité, les schémas décentrés (cf. § 8.2.1) sont généralement privilégiés pour des raisons de robustesse. C'est notamment le cas dans le code CEDRE. Cependant, des flux centrés sont parfois aussi utilisés, mais l'ajout d'une diffusion artificielle est alors nécessaire pour stabiliser les schémas.

Quoi qu'il en soit, il est connu que les schémas décentrés provoquent un phénomène de diffusion numérique, dégradant ainsi leur précision. Cette diffusion numérique peut être réduite, notamment grâce à la stratégie MUSCL. Comme nous l'avons vu précédemment, il s'agit de fournir de nouveaux arguments à la fonction de flux numérique sans modification de son expression. Les arguments du flux numérique ne sont plus les états U_i^n et U_j^n, stockés aux barycentres des cellules. Ils sont remplacés par des états interpolés sur les faces S_{ij}, et notés U_{ij}^n et U_{ji}^n. Le schéma MUSCL volumes finis correspondant est alors donné par la relation

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \Delta t \sum_{j\in\mathcal{V}(i)} \frac{|S_{ij}|}{|K_i|}\,\phi_{ij}\left(U_{ij}^n, U_{ji}^n\right)\,, \tag{9.10}$$

où l'on note que pour simplifier les notations, la dépendance du flux numérique au vecteur normal $\boldsymbol{n}_{ij}$ est à présent omise. Toute la difficulté réside alors dans la façon de calculer les interpolations de manière à atteindre une précision d'ordre 2 pour des solutions suffisamment régulières, tout en respectant le Principe du Maximum Local (PML) exprimé par la Définition 1, et qui garantit la stabilité L^∞ du schéma.

Définition 1. *Le schéma MUSCL écrit en (9.10) respecte le PML si pour tout élément K_i, la valeur actualisée de la variable au temps t^{n+1} est bornée par les valeurs minimale et maximale au temps t^n, dans un certain voisinage $\mathcal{U}(K_i)$ qui peut être d'étendue quelconque. Notons $\overline{\mathcal{U}_i}$ l'union $\mathcal{U}(K_i)\cup\{K_i\}$, alors le PML s'écrit formellement :*

$$\forall\, K_i\in\Omega, \quad \min_{K_j\in\overline{\mathcal{U}_i}} U_j^n \;\le\; U_i^{n+1} \;\le\; \max_{K_j\in\overline{\mathcal{U}_i}} U_j^n\,. \tag{9.11}$$

9.2.2 Nouvelle méthode multipente

La nouvelle méthode MUSCL multipente est dédiée aux maillages non structurés généraux, et elle permet d'opérer les reconstructions des variables aux centres des faces $\boldsymbol{M}_{ij}$. La technique généralise en quelque sorte la méthode multipente développée et analysée par BUFFARD et CLAIN [29], CLAIN et CLAUZON [45] et CLAUZON [46]. De la même manière que dans ces travaux, et comme dans la technique MUSCL initiale de van LEER [278], il s'agit de calculer deux pentes scalaires relatives à chaque face S_{ij} d'un élément K_i donné : une ***pente amont*** notée p_{ij}^- et ***une pente aval*** notée p_{ij}^+. Classiquement, on introduit le rapport r_{ij} entre ces pentes, tel que

$$r_{ij} = \frac{p_{ij}^-}{p_{ij}^+} \,. \tag{9.12}$$

Un limiteur de pente, prenant pour argument ce rapport r_{ij}, est alors utilisé et intégré au calcul des interpolations. De cette manière, on prévient l'apparition d'oscillations non physiques dans la solution, assurant ainsi la stabilité du schéma. Les reconstructions de part et d'autre de la face S_{ij}, calculées depuis les cellules K_i et K_j, et notées respectivement U_{ij} et U_{ji}, sont ainsi exprimées par les relations

$$U_{ij} = U_i + p_{ij}^+ \, \varphi\left(r_{ij}, \mathcal{G}_{ij}\right) \|\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{M}_{ij}\| \,, \tag{9.13}$$

$$U_{ji} = U_j + p_{ji}^+ \, \varphi\left(r_{ji}, \mathcal{G}_{ji}\right) \|\boldsymbol{B}_j\boldsymbol{M}_{ij}\| \,, \tag{9.14}$$

où $\mathcal{G}_{ij}$ est un ensemble de paramètres géométriques, qui sera précisé ultérieurement.

Dans les paragraphes suivants, nous commençons par préciser la procédure utilisée pour calculer les pentes amont et aval sur maillage non structuré général, en 2D et en 3D. Ensuite, des propriétés essentielles de la méthode sont démontrées, telles que la consistance d'ordre 2 et la stabilité L^∞. Cette étape met en évidence une zone de stabilité pour les limiteurs, servant de base à la construction d'un limiteur performant.

9.3 Construction des pentes

En plus du voisinage par faces $\mathcal{V}(i)$, le voisinage $\mathcal{W}(i)$ est maintenant défini comme l'ensemble des volumes de contrôle partageant au moins un sommet avec la cellule K_i. On a donc $\mathcal{V}(i) \subset \mathcal{W}(i)$. Considérons alors le système formé par l'élément K_i de barycentre $\boldsymbol{B}_i$, et la face S_{ij} de barycentre $\boldsymbol{M}_{ij}$, pour laquelle on cherche à calculer une pente amont et une pente aval. Le principe est de déterminer deux points pivots $\boldsymbol{H}_{ij}^-$ et $\boldsymbol{H}_{ij}^+$, situés sur l'axe $(\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{M}_{ij})$, respectivement en amont et en aval du point $\boldsymbol{B}_i$ (voir la Figure 9.1). Ces points pivots ne sont a priori ni des sommets du maillage, ni des centres de cellules. Cependant, la manière dont ils sont construits permet d'évaluer des approximations consistantes à l'ordre 2 de la variable scalaire, interpolées à partir des valeurs au centre des cellules du voisinage. Les valeurs calculées en ces deux points sont notées respectivement $U_{H_{ij}^-}$ et $U_{H_{ij}^+}$, et permettent de calculer les pentes amont et aval comme

$$p_{ij}^+ = \frac{U_{H_{ij}^+} - U_i}{\|\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{H}_{ij}^+\|} \,, \qquad p_{ij}^- = \frac{U_i - U_{H_{ij}^-}}{\|\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{H}_{ij}^-\|} \,. \tag{9.15}$$

La procédure permettant de déterminer les points $\boldsymbol{H}_{ij}^-$ et $\boldsymbol{H}_{ij}^+$, et donc les valeurs $U_{H_{ij}^-}$ et $U_{H_{ij}^+}$, dépend de la dimension de l'espace Ω. Il existe ainsi un algorithme en 2D (cf. § 9.3.1) et un algorithme en 3D (cf. § 9.3.2).

9.3.1 Algorithme en 2D

Introduisons $K_{ij_1}^- \in \mathcal{W}(i)$, défini comme l'élement voisin de K_i ***le plus décentré*** par rapport à la direction $(\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{M}_{ij})$, c'est-à-dire tel que

$$\cos\left(\boldsymbol{B}_{ij_1}^-\boldsymbol{B}_i, \boldsymbol{B}_i\boldsymbol{M}_{ij}\right) = \max_{k\in\mathcal{W}(i)} \cos\left(\boldsymbol{B}_k\boldsymbol{B}_i, \boldsymbol{B}_i\boldsymbol{M}_{ij}\right) \,. \tag{9.16}$$

Introduisons ensuite $K_{ij_2}^- \in \mathcal{W}(i)$, le second voisin le plus décentré, et obligatoirement situé de l'autre côté de l'axe $(\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{M}_{ij})$. En d'autres termes, $K_{ij_2}^-$ est tel que

$$\cos\left(\boldsymbol{B}_{ij_2}^-\boldsymbol{B}_i, \boldsymbol{B}_i\boldsymbol{M}_{ij}\right) = \max_{k\in\overline{\mathcal{W}}(i)} \cos\left(\boldsymbol{B}_k\boldsymbol{B}_i, \boldsymbol{B}_i\boldsymbol{M}_{ij}\right) \,, \tag{9.17}$$

avec

$$\overline{\mathcal{W}}(i) = \left\{k \,|\, k \in \mathcal{W}(i),\ K_k \neq K_{ij_1}^-,\ \sin\left(\boldsymbol{B}_k\boldsymbol{B}_i, \boldsymbol{B}_i\boldsymbol{M}_{ij}\right) \sin\left(\boldsymbol{B}_{ij_1}^-\boldsymbol{B}_i, \boldsymbol{B}_i\boldsymbol{M}_{ij}\right) \leq 0\right\} \,. \tag{9.18}$$

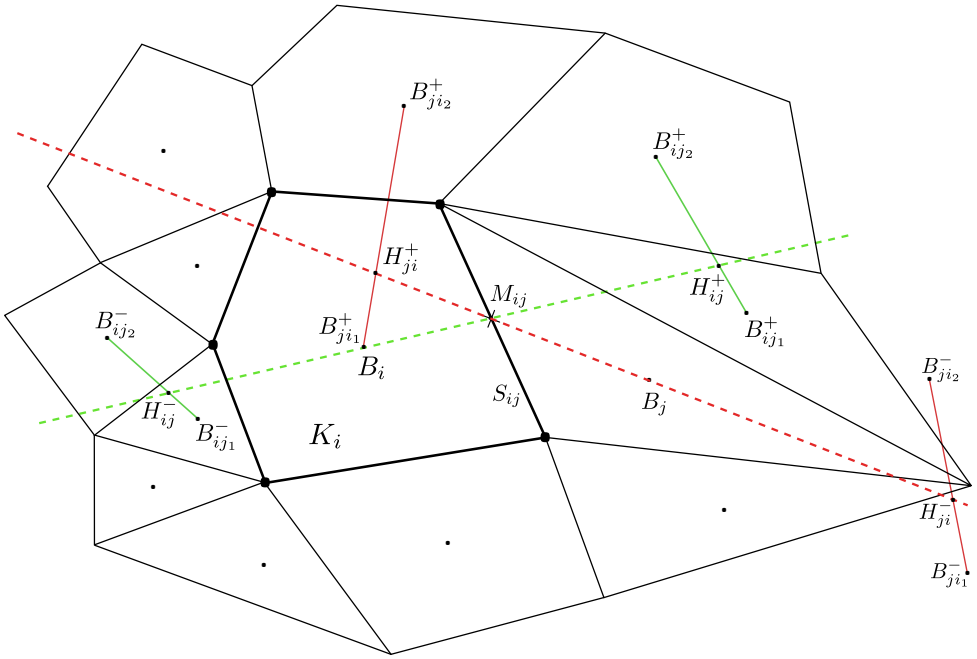


FIGURE 9.1 – ***Détermination des points pivots amont H^-_{ij} et aval H^+_{ij} en 2D.***

Ainsi, il est possible de définir le point d'intersection $\boldsymbol{H}^-_{ij}$ entre la droite $(\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{M}_{ij})$ et la droite $\left(\boldsymbol{B}^-_{ij_1}\boldsymbol{B}^-_{ij_2}\right)$, de sorte que $\boldsymbol{H}^-_{ij}$ soit situé à l'intérieur du segment $\left[\boldsymbol{B}^-_{ij_1}\boldsymbol{B}^-_{ij_2}\right]$. Par conséquent, le point $\boldsymbol{H}^-_{ij}$ possède des coordonnées barycentriques par rapport aux points $(\boldsymbol{B}^-_{ij_1}, \boldsymbol{B}^-_{ij_2})$, que l'on note $(\beta^-_{ij_1}, \beta^-_{ij_2})$, qui sont positives et définies par

$$\beta^-_{ij_1} = \frac{\|\boldsymbol{B}^-_{ij_2}\boldsymbol{H}^-_{ij}\|}{\|\boldsymbol{B}^-_{ij_1}\boldsymbol{B}^-_{ij_2}\|} \geq 0, \qquad \beta^-_{ij_2} = \frac{\|\boldsymbol{B}^-_{ij_1}\boldsymbol{H}^-_{ij}\|}{\|\boldsymbol{B}^-_{ij_1}\boldsymbol{B}^-_{ij_2}\|} \geq 0, \qquad \beta^-_{ij_1} + \beta^-_{ij_2} = 1\,. \tag{9.19}$$

Sur le même principe, on cherche pour la direction aval les voisins $K^+_{ij_1}$ et $K^+_{ij_2}$, puis on calcule le point d'intersection $\boldsymbol{H}^+_{ij}$ et ses coordonnées barycentriques $(\beta^+_{ij_1}, \beta^+_{ij_2})$, telles que

$$\beta^+_{ij_1} = \frac{\|\boldsymbol{B}^+_{ij_2}\boldsymbol{H}^+_{ij}\|}{\|\boldsymbol{B}^+_{ij_1}\boldsymbol{B}^+_{ij_2}\|} \geq 0, \qquad \beta^+_{ij_2} = \frac{\|\boldsymbol{B}^+_{ij_1}\boldsymbol{H}^+_{ij}\|}{\|\boldsymbol{B}^+_{ij_1}\boldsymbol{B}^+_{ij_2}\|} \geq 0, \qquad \beta^+_{ij_1} + \beta^+_{ij_2} = 1\,. \tag{9.20}$$

Ces coordonnées sont ensuite utilisées pour calculer les approximations de la variable scalaire aux points $\boldsymbol{H}^-_{ij}$ et $\boldsymbol{H}^+_{ij}$, en utilisant de simples moyennes pondérées :

$$U_{H^-_{ij}} = \beta^-_{ij_1} U^-_{ij_1} + \beta^-_{ij_2} U^-_{ij_2}\,, \qquad U_{H^+_{ij}} = \beta^+_{ij_1} U^+_{ij_1} + \beta^+_{ij_2} U^+_{ij_2}\,, \tag{9.21}$$

où $U^-_{ij_1}$, $U^-_{ij_2}$, $U^+_{ij_1}$, et $U^+_{ij_2}$, sont les valeurs aux barycentres des cellules $\boldsymbol{B}^-_{ij_1}$, $\boldsymbol{B}^-_{ij_2}$, $\boldsymbol{B}^+_{ij_1}$, et $\boldsymbol{B}^+_{ij_2}$. Lorsque le champ de la variable scalaire est linéaire, plus les distances $\|\boldsymbol{B}^-_{ij_1}\boldsymbol{B}^-_{ij_2}\|$ et $\|\boldsymbol{B}^+_{ij_1}\boldsymbol{B}^+_{ij_2}\|$ sont courtes, plus l'erreur d'approximation de $U_{H^-_{ij}}$ et $U_{H^+_{ij}}$ est faible. C'est pourquoi on s'attache à sélectionner les voisins situés le plus en amont et en aval possible.

9.3.2 Algorithme en 3D

L'extension de l'algorithme à des configurations 3D n'est pas immédiate. La différence ici est qu'il est nécessaire de sélectionner trois voisins en amont et en aval au lieu de deux, pour déterminer les points pivots. Si l'on prend l'exemple de la direction amont, il faut sélectionner trois voisins $K^-_{ij_1}$, $K^-_{ij_2}$ et $K^-_{ij_3}$, tels qu'ils définissent un plan dont le point d'intersection avec la droite $(\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{M}_{ij})$ soit situé à l'intérieur du triangle de sommets $\boldsymbol{B}^-_{ij_1}$, $\boldsymbol{B}^-_{ij_2}$ et $\boldsymbol{B}^-_{ij_3}$ (cf. Figure 9.2 pour le côté aval). Le point d'intersection $\boldsymbol{H}^-_{ij}$ a donc des coordonnées barycentriques normalisées par rapport à $(\boldsymbol{B}^-_{ij_1}, \boldsymbol{B}^-_{ij_2}, \boldsymbol{B}^-_{ij_3})$ qui sont uniques et positives. Ces coordonnées barycentriques sont notées $\beta^-_{ij_1}$, $\beta^-_{ij_2}$, $\beta^-_{ij_3}$, et peuvent être calculées comme des rapports d'aires de triangles :

$$\beta^-_{ij_1} = \frac{\mathcal{A}\left(\boldsymbol{H}^-_{ij}\boldsymbol{B}^-_{ij_2}\boldsymbol{B}^-_{ij_3}\right)}{\mathcal{A}\left(\boldsymbol{B}^-_{ij_1}\boldsymbol{B}^-_{ij_2}\boldsymbol{B}^-_{ij_3}\right)}\,, \quad \beta^-_{ij_2} = \frac{\mathcal{A}\left(\boldsymbol{H}^-_{ij}\boldsymbol{B}^-_{ij_1}\boldsymbol{B}^-_{ij_3}\right)}{\mathcal{A}\left(\boldsymbol{B}^-_{ij_1}\boldsymbol{B}^-_{ij_2}\boldsymbol{B}^-_{ij_3}\right)}\,, \quad \beta^-_{ij_3} = \frac{\mathcal{A}\left(\boldsymbol{H}^-_{ij}\boldsymbol{B}^-_{ij_1}\boldsymbol{B}^-_{ij_2}\right)}{\mathcal{A}\left(\boldsymbol{B}^-_{ij_1}\boldsymbol{B}^-_{ij_2}\boldsymbol{B}^-_{ij_3}\right)}\,, \tag{9.22}$$

$$\beta^-_{ij_1} \geq 0, \quad \beta^-_{ij_2} \geq 0, \quad \beta^-_{ij_3} \geq 0, \qquad \beta^-_{ij_1} + \beta^-_{ij_2} + \beta^-_{ij_3} = 1\,.$$

Ainsi, l'approximation de la variable scalaire au point $\boldsymbol{H}_{ij}^{-}$ est obtenue de nouveau comme une simple moyenne pondérée :

$$U_{H_{ij}^{-}} = \beta_{ij_1}^{-} U_{ij_1}^{-} + \beta_{ij_2}^{-} U_{ij_2}^{-} + \beta_{ij_3}^{-} U_{ij_3}^{-} \,. \tag{9.23}$$

La même procédure appliquée à la direction aval donne :

$$U_{H_{ij}^{+}} = \beta_{ij_1}^{+} U_{ij_1}^{+} + \beta_{ij_2}^{+} U_{ij_2}^{+} + \beta_{ij_3}^{+} U_{ij_3}^{+} \,. \tag{9.24}$$

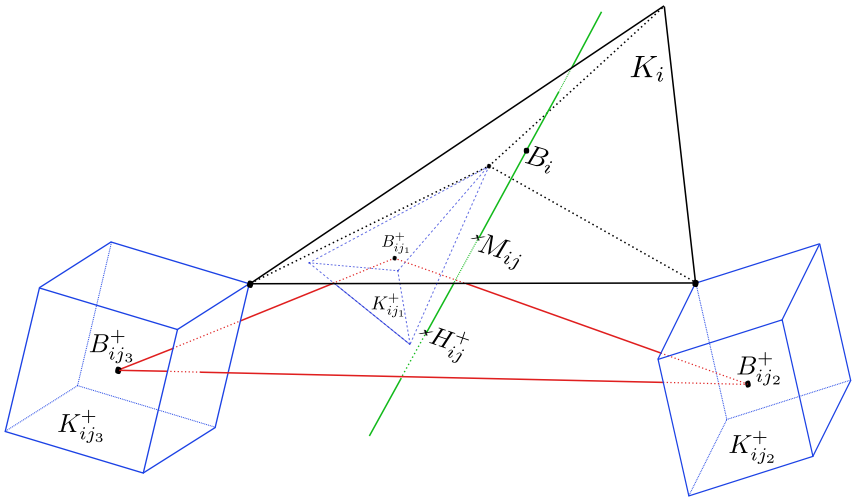


FIGURE 9.2 – ***Détermination du point pivot aval H_{ij}^{+} en 3D.***

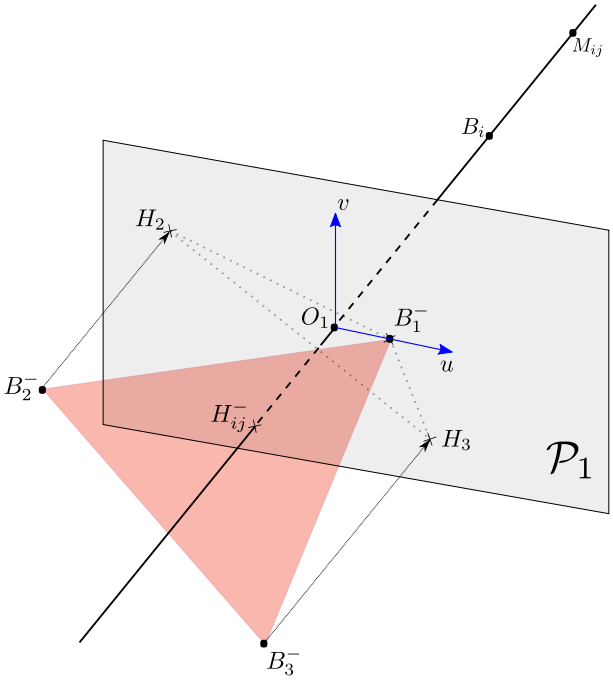


FIGURE 9.3 – ***Illustration de l'algorithme 3D pour déterminer le point pivot amont H_{ij}^{-}.***

L'algorithme utilisé pour sélectionner les voisins $K_{ij_1}^{\pm}$, $K_{ij_2}^{\pm}$ et $K_{ij_3}^{\pm}$, est significativement plus complexe que l'algorithme utilisé en 2D. Nous donnons ci-dessous une brève description de cet algorithme appliqué au cas des voisins amont.

Étape 1. trier les éléments K_k appartenant au voisinage $\mathcal{W}(i)$ selon un ordre décroissant de la valeur $\cos\left(\boldsymbol{B}_k\boldsymbol{B}_i, \boldsymbol{B}_i\boldsymbol{M}_{ij}\right)$. Cela permet d'établir une liste ordonnée $(K_1, K_2, K_3, ..., K_z)$, où z est le nombre d'éléments appartenant au voisinage $\mathcal{W}(i)$.

Étape 2. déterminer l'équation du plan $\mathcal{P}_1$, contenant le barycentre $\boldsymbol{B}_1$ du premier élément de la liste, et dont $\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{M}_{ij}$ est un vecteur normal.

Étape 3. construire un repère orthonormé $(\boldsymbol{O}_1, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})$ dans le plan $\mathcal{P}_1$, où $\boldsymbol{O}_1$ est le point d'intersection entre $(\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{M}_{ij})$ et $\mathcal{P}_1$. Les vecteurs de base sont définis comme suit :

$$\boldsymbol{u} = \frac{\boldsymbol{O}_1\boldsymbol{B}_1}{\|\boldsymbol{O}_1\boldsymbol{B}_1\|}\,, \tag{9.25}$$

tandis que $\boldsymbol{v}$ est l'un des deux vecteurs unitaires appartenant à $\mathcal{P}_1$ et orthogonal à $\boldsymbol{u}$. A noter qu'il peut y avoir une singularité lorsque $\boldsymbol{B}_1$ est positionné strictement sur l'axe $(\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{M}_{ij})$, ce qui implique $\boldsymbol{O}_1 = \boldsymbol{B}_1$. C'est par exemple toujours le cas pour un maillage structuré. Dans ce cas, ce n'est pas un problème puisque nous disposons alors d'une valeur consistante dans la direction $(\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{M}_{ij})$. Il n'est donc pas nécessaire de chercher d'autres voisins, et l'algorithme peut être stoppé à cette étape. En pratique, la détection d'un voisin strictement aligné implique un certain seuil de tolérance.

Étape 4. déterminer $\boldsymbol{H}_2$ et $\boldsymbol{H}_3$, les projections orthogonales sur le plan $\mathcal{P}_1$ des points $\boldsymbol{B}_2$ et $\boldsymbol{B}_3$ (barycentres des deuxième et troisième voisins dans la liste ordonnée), comme représenté sur la Figure 9.3.

Étape 5. vérifier la compatibilité du plan $(\boldsymbol{B}_1\boldsymbol{B}_2\boldsymbol{B}_3)$ avec plusieurs critères, en effectuant des tests géométriques dans le plan $\mathcal{P}_1$. Le premier critère obligatoire est que le point d'intersection entre la droite $(\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{M}_{ij})$ et le plan $(\boldsymbol{B}_1\boldsymbol{B}_2\boldsymbol{B}_3)$ doit exister, et par ailleurs être situé à l'intérieur du triangle $\boldsymbol{B}_1\boldsymbol{B}_2\boldsymbol{B}_3$. Mais il existe d'autres critères possibles, par exemple pour empêcher que les triangles aient des angles trop aigus ou trop obtus.

Étape 6. si les tests sont concluants, alors les éléments K_1, K_2 et K_3 sont sélectionnés et deviennent donc $K^-_{ij_1}$, $K^-_{ij_2}$ et $K^-_{ij_3}$. Le point d'intersection devient le point pivot $\boldsymbol{H}^-_{ij}$. Ainsi, les coordonnées barycentriques $\beta^-_{ij_1}, \beta^-_{ij_2}$ et $\beta^-_{ij_3}$ peuvent être calculées, de même que l'approximation consistante $U_{H^-_{ij}}$.

Étape 7. tant que les tests ne sont pas concluants, alors on essaie avec un autre triplet d'éléments $(\boldsymbol{B}_\alpha\boldsymbol{B}_\beta\boldsymbol{B}_\gamma)$ choisi dans la liste ordonnée, où les indices α, β, γ sont successivement incrémentés en cherchant à minimiser leur somme. Autrement formulé, cela revient à essayer successivement les triplets $(\boldsymbol{B}_1\boldsymbol{B}_2\boldsymbol{B}_4)$, $(\boldsymbol{B}_1\boldsymbol{B}_3\boldsymbol{B}_4)$, $(\boldsymbol{B}_1\boldsymbol{B}_2\boldsymbol{B}_5)$, $(\boldsymbol{B}_2\boldsymbol{B}_3\boldsymbol{B}_4)$, et ainsi de suite. De cette manière, l'erreur d'approximation dans le calcul de $U_{H^-_{ij}}$ est également minimisée. Dans le cas de figure où aucun plan convenable n'a pu être construit à partir de voisins en amont, c'est-à-dire tels que $\cos(\boldsymbol{B}_k\boldsymbol{B}_i, \boldsymbol{B}_i\boldsymbol{M}_{ij}) > 0$, alors il n'y a pas de valeur reconstruite au point $\boldsymbol{M}_{ij}$ et le schéma dégénère localement à l'ordre 1. A noter que cela ne se produit généralement qu'à proximité des limites du domaine de calcul, là où le nombre de voisins disponibles est potentiellement réduit.

La procédure est la même pour le côté aval, mais en démarrant l'algorithme à partir du dernier élément de la liste ordonnée des voisins. Il est important de noter que cet algorithme ne traite que de données géométriques. Si le maillage est fixe, l'algorithme n'a donc à être exécuté qu'une seule fois, en début de calcul. Les données utiles sont stockées en mémoire et utilisées ensuite à chaque itération de la simulation, pour le calcul des pentes.

9.4 Propriétés mathématiques de la reconstruction

9.4.1 Précision d'ordre 2

Précision de l'approximation des flux

L'erreur E faite dans l'approximation du flux s'écrit

$$E = \int_{S_{ij}} \boldsymbol{F}\cdot\boldsymbol{n}_{ij}\,dS \quad - \quad \phi_{ij}\left(U_{ij}, U_{ji}, \boldsymbol{n}_{ij}\right)|S_{ij}|\,. \tag{9.26}$$

Supposons un flux linéaire tel que $\boldsymbol{F}(U) = \boldsymbol{\lambda}U$, et un flux numérique décentré :

$$\phi_{ij}\left(U_{ij}, U_{ji}, \boldsymbol{n}_{ij}\right) = \max\Big(\boldsymbol{\lambda}\cdot\boldsymbol{n}_{ij}, 0\Big)U_{ij} + \min\Big(\boldsymbol{\lambda}\cdot\boldsymbol{n}_{ij}, 0\Big)U_{ji}\,. \tag{9.27}$$

Si l'on suppose par exemple que $\boldsymbol{\lambda}\cdot\boldsymbol{n}_{ij} \geq 0$, et si $\boldsymbol{X}$ désigne un point de la face S_{ij}, alors on a :

$$E = \boldsymbol{\lambda}\cdot\boldsymbol{n}_{ij}\left(\int_{S_{ij}} U(\boldsymbol{X})d\boldsymbol{X} - U_{ij}|S_{ij}|\right)\,. \tag{9.28}$$

Appelons $H(U)$ la matrice hessienne, et écrivons le développement de Taylor à l'ordre 2 :

$$U(\boldsymbol{X}) = U(\boldsymbol{M}_{ij}) + \boldsymbol{\nabla}U\Big|_{M_{ij}}\cdot\boldsymbol{M}_{ij}\boldsymbol{X} + \frac{1}{2}\boldsymbol{M}_{ij}\boldsymbol{X}^t H(U)\Big|_{M_{ij}}\cdot\boldsymbol{M}_{ij}\boldsymbol{X} + o\Big(\|\boldsymbol{M}_{ij}\boldsymbol{X}\|^2\Big)\,. \tag{9.29}$$

Une manière de montrer que la reconstruction est d'ordre 2 est de prouver que l'erreur est nulle pour un champ scalaire à gradient constant, c'est-à-dire un champ tel que le développement de Taylor s'écrit exactement :

$$U(\boldsymbol{X}) = U(\boldsymbol{M}_{ij}) + \boldsymbol{\nabla} U \cdot \boldsymbol{M}_{ij}\boldsymbol{X} \,, \tag{9.30}$$

où $\boldsymbol{\nabla} U$ représente le gradient uniforme du scalaire U. Dans ce cas, l'erreur normalisée $\overline{E} = E/\left(|S_{ij}|\, \boldsymbol{\lambda} \cdot \boldsymbol{n}_{ij}\right)$ s'écrit :

$$\overline{E} \;=\; \Big[U(\boldsymbol{M}_{ij}) - U_{ij}\Big] + \frac{1}{|S_{ij}|}\boldsymbol{\nabla} U \cdot \int_{S_{ij}} \boldsymbol{M}_{ij}\boldsymbol{X} d\boldsymbol{X} \,. \tag{9.31}$$

Or, l'intégrale qui apparait au second membre s'annule puisque le point $\boldsymbol{M}_{ij}$ est le barycentre de la face S_{ij}. Aussi, pour prouver la précision d'ordre 2, il reste à prouver que la procédure de reconstruction implique $U_{ij} = U(\boldsymbol{M}_{ij})$ pour un champ scalaire à gradient constant.

Précision des reconstructions

Tout d'abord, la Proposition 1 est énoncée, puis démontrée.

Proposition 1. *Les approximations $U_{H_{ij}^+}$ et $U_{H_{ij}^-}$, calculées aux points pivots $\boldsymbol{H}_{ij}^+$ and $\boldsymbol{H}_{ij}^-$, sont d'ordre 2, en 2D comme en 3D.*

Démonstration. Nous sommes sous l'hypothèse d'un champ scalaire à gradient $\boldsymbol{\nabla} U$ constant, ce qui nous permet d'écrire

$$\forall \boldsymbol{x} \in \Omega, \quad \forall \boldsymbol{x}_0 \in \Omega, \quad U(\boldsymbol{x}) \;=\; U(\boldsymbol{x}_0) + \boldsymbol{\nabla} U \cdot (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_0) \;. \tag{9.32}$$

D'après les relations (9.19) à (9.24), on peut écrire de manière générique

$$U_{H_{ij}^+} \;=\; \sum_{l=1}^{d} \beta_{ijl}^+ U_{ijl}^+ \;=\; \sum_{l=1}^{d} \beta_{ijl}^+ U_i \;+\; \sum_{l=1}^{d} \beta_{ijl}^+ \left(U_{ijl}^+ - U_i\right) \,, \tag{9.33}$$

où d est le nombre de dimensions de l'espace ($d = 2$ en 2D et $d = 3$ en 3D). D'après (9.32), et puisque $\sum_{l=1}^{d} \beta_{ijl}^+ = 1$, il est possible d'écrire

$$U_{H_{ij}^+} \;=\; U_i \;+\; \boldsymbol{\nabla} U \cdot \sum_{l=1}^{d} \beta_{ijl}^+ \boldsymbol{B}_i \boldsymbol{B}_{ijl}^+ \,. \tag{9.34}$$

Puis, par décomposition du vecteur $\boldsymbol{B}_i \boldsymbol{B}_{ijl}^+$, il vient :

$$U_{H_{ij}^+} \;=\; U_i \;+\; \boldsymbol{\nabla} U \cdot \boldsymbol{B}_i \boldsymbol{H}_{ij}^+ \sum_{l=1}^{d} \beta_{ijl}^+ \;+\; \boldsymbol{\nabla} U \cdot \sum_{l=1}^{d} \beta_{ijl}^+ \boldsymbol{H}_{ij}^+ \boldsymbol{B}_{ijl}^+ \,. \tag{9.35}$$

Par propriété du barycentre, nous avons

$$\sum_{l=1}^{d} \beta_{ijl}^+ \boldsymbol{H}_{ij}^+ \boldsymbol{B}_{ijl}^+ \;=\; \boldsymbol{0} \,, \tag{9.36}$$

ce qui donne finalement :

$$U_{H_{ij}^+} \;=\; U_i \;+\; \boldsymbol{\nabla} U \cdot \boldsymbol{B}_i \boldsymbol{H}_{ij}^+ \;=\; U(\boldsymbol{H}_{ij}^+) \,, \tag{9.37}$$

achevant ainsi la démonstration. Un résultat équivalent s'obtient immédiatement pour $U_{H_{ij}^-}$:

$$U_{H_{ij}^-} \;=\; U(\boldsymbol{H}_{ij}^-) \,. \tag{9.38}$$

□

Par conséquent, puisque le champ scalaire est supposé linéaire, les approximations aux points pivots sont exactes :

$$U_{H_{ij}^+} \;=\; U(\boldsymbol{H}_{ij}^+) \,, \qquad U_{H_{ij}^-} \;=\; U(\boldsymbol{H}_{ij}^-) \,. \tag{9.39}$$

Par ailleurs, la relation (9.32) permet d'écrire :

$$U_{H_{ij}^+} \;=\; U_i \;+\; \boldsymbol{\nabla} U \cdot \boldsymbol{B}_i \boldsymbol{H}_{ij}^+ \,, \qquad U_{H_{ij}^-} \;=\; U_i \;+\; \boldsymbol{\nabla} U \cdot \boldsymbol{B}_i \boldsymbol{H}_{ij}^- \,. \tag{9.40}$$

Introduisons ensuite les vecteurs unitaires $\boldsymbol{v}_{ij}^{+}$ et $\boldsymbol{v}_{ij}^{-}$, portés par la droite $(\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{M}_{ij})$, tels que

$$\boldsymbol{v}_{ij}^{+} = \frac{\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{H}_{ij}^{+}}{\|\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{H}_{ij}^{+}\|}\,, \qquad \boldsymbol{v}_{ij}^{-} = \frac{\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{H}_{ij}^{-}}{\|\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{H}_{ij}^{-}\|}\,, \qquad \boldsymbol{v}_{ij}^{+} = -\boldsymbol{v}_{ij}^{-}\,. \tag{9.41}$$

Ainsi, les pentes amont et aval deviennent :

$$p_{ij}^{-} = \frac{U_i - U_{H_{ij}^{-}}}{\|\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{H}_{ij}^{-}\|} = -\boldsymbol{\nabla}U\cdot\boldsymbol{v}_{ij}^{-}\,, \qquad p_{ij}^{+} = \frac{U_{H_{ij}^{+}} - U_i}{\|\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{H}_{ij}^{+}\|} = \boldsymbol{\nabla}U\cdot\boldsymbol{v}_{ij}^{+} = p_{ij}^{-}\,. \tag{9.42}$$

Nous obtenons donc, sous l'hypothèse d'un champ scalaire à gradient uniforme :

$$r_{ij} = \frac{p_{ij}^{-}}{p_{ij}^{+}} = 1\,. \tag{9.43}$$

Aussi, si la fonction limiteur est telle que $\varphi(1) = 1$, alors la reconstruction U_{ij} peut s'écrire

$$U_{ij} \;=\; U_i + p_{ij}^{+}\,\varphi\left(r_{ij},\mathcal{G}_{ij}\right)\|\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{M}_{ij}\| \;=\; U_i + p_{ij}^{+}\|\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{M}_{ij}\|\,, \tag{9.44}$$

puis

$$U_{ij} \;=\; U_i + \boldsymbol{\nabla}U\cdot\boldsymbol{v}_{ij}^{+}\|\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{M}_{ij}\| \;=\; U_i + \boldsymbol{\nabla}U\cdot\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{M}_{ij} \;=\; U(\boldsymbol{M}_{ij})\,, \tag{9.45}$$

ce qui permet de conclure sur la précision d'ordre 2.

9.4.2 Stabilité L^∞

Nous démontrons dans cette section que le schéma volumes finis (9.10), associé à la procédure de recontruction MUSCL multipente décrite précédemment, peut être écrit sous la forme d'un schéma à coefficients positifs et bornés, impliquant ainsi un principe du maximum local (PML, cf. Définition 1) et par voie de conséquence la stabilité L^∞.

9.4.2.1 Propriétés de la fonction flux numérique et première réécriture du schéma

Le flux numérique ϕ_{ij} est une fonction de deux variables (en omettant la dépendence au vecteur normal $\boldsymbol{n}_{ij}$), que l'on note par exemple U_1 et U_2 :

$$\phi_{ij} = \phi_{ij}(U_1, U_2)\,. \tag{9.46}$$

On affecte à U_1 et U_2 une certaine évaluation de la variable scalaire provenant de chaque côté de la face S_{ij}. Plus précisément, U_1 et U_2 peuvent être les états U_i^n et U_j^n aux barycentres des cellules adjacentes, ou des états interpolés aux faces U_{ij}^n et U_{ji}^n suivant la méthode MUSCL, auquel cas le schéma est censé atteindre une précision d'ordre 2.

Par ailleurs, la fonction flux numérique doit respecter quelques propriétés classiques. Premièrement, elle doit être ***consistante avec le flux physique***. Dans l'hypothèse où le flux physique ne dépend que de u, et où le champ scalaire possède une valeur uniforme notée U, alors la condition de consistance du flux numérique s'écrit :

$$\forall\, U\in\mathbb{R}\,, \quad \phi_{ij}(U,U) = \boldsymbol{F}(U)\cdot\boldsymbol{n}_{ij}\,. \tag{9.47}$$

Cette propriété implique la relation utile suivante :

$$\sum_{j\in\mathcal{V}(i)} |S_{ij}|\phi_{ij}(U,U) = \boldsymbol{F}(U)\cdot\sum_{j\in\mathcal{V}(i)} |S_{ij}|\boldsymbol{n}_{ij} = 0\,. \tag{9.48}$$

A noter que la condition de consistance est plus complexe lorsque le flux $\boldsymbol{F}$ dépend aussi de $\boldsymbol{x}$ et de t. En particulier, la relation utile (9.48) ne peut être qu'approchée dans ce cas (CLAUZON [46]). Pour les besoins de la démonstration, nous devons donc supposer que le flux physique ne dépend que de u. Deuxièmement, le flux numérique doit être ***monotone***, c'est-à-dire vérifier :

$$\frac{\partial\phi_{ij}(U_1,U_2)}{\partial U_1} \geq 0\,, \qquad \frac{\partial\phi_{ij}(U_1,U_2)}{\partial U_2} \leq 0\,. \tag{9.49}$$

D'après la relation (9.48), le schéma (9.10) peut être reformulé en

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \sum_{j\in\mathcal{V}(i)} \Delta t\frac{|S_{ij}|}{|K_i|}\Big[\phi_{ij}\left(U_{ij},U_{ji}\right) - \phi_{ij}\left(U_{ij},U_i\right) + \phi_{ij}\left(U_{ij},U_i\right) - \phi_{ij}\left(U_i,U_i\right)\Big]\,. \tag{9.50}$$

Le théorème des accroissement finis (ou théorème de la valeur moyenne) fournit les relations suivantes : $\exists\, \widetilde{U_{ij}} \in \left[\min(U_i, U_{ij}), \max(U_i, U_{ij})\right]$, $\exists\, U_{ij}^{\star} \in \left[\min(U_i, U_{ji}), \max(U_i, U_{ji})\right]$, tel que

$$\frac{\partial \phi_{ij}}{\partial U_1}\left(\widetilde{U_{ij}}, U_i\right) = \frac{\phi_{ij}\left(U_{ij}, U_i\right) - \phi_{ij}\left(U_i, U_i\right)}{U_{ij} - U_i}\,, \tag{9.51}$$

$$\frac{\partial \phi_{ij}}{\partial U_2}\left(U_{ij}, U_{ij}^{\star}\right) = \frac{\phi_{ij}\left(U_{ij}, U_{ji}\right) - \phi_{ij}\left(U_{ij}, U_i\right)}{U_{ji} - U_i}\,. \tag{9.52}$$

Par conséquent, il vient :

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \sum_{j\in\mathcal{V}(i)} \Delta t\, \frac{|S_{ij}|}{|K_i|}\left[\frac{\partial \phi_{ij}}{\partial U_1}\left(\widetilde{U_{ij}}, U_i\right)(U_{ij} - U_i) + \frac{\partial \phi_{ij}}{\partial U_2}\left(U_{ij}, U_{ij}^{\star}\right)(U_{ji} - U_i)\right]. \tag{9.53}$$

Les paramètres suivants sont ensuite introduits :

$$\nu_{ij}^{+} = \Delta t\, \frac{|S_{ij}|}{|K_i|}\frac{\partial \phi_{ij}}{\partial U_1}\left(\widetilde{U_{ij}}, U_i\right) \geq 0, \qquad \nu_{ij}^{-} = -\Delta t\, \frac{|S_{ij}|}{|K_i|}\frac{\partial \phi_{ij}}{\partial U_2}\left(U_{ij}, U_{ij}^{\star}\right) \geq 0\,. \tag{9.54}$$

Ils sont positifs en raison de la monotonie du flux numérique. Nous obtenons alors la forme intermédiaire suivante du schéma :

$$\boxed{U_i^{n+1} = U_i^n + \sum_{j\in\mathcal{V}(i)}\left[\nu_{ij}^{-}(U_{ji} - U_i) - \nu_{ij}^{+}(U_{ij} - U_i)\right].} \tag{9.55}$$

A ce stade, l'objectif consiste à réécrire les différences $U_{ij} - U_i$ et $U_{ji} - U_i$ de manière à pouvoir reformuler le schéma sous la forme :

$$U_i^{n+1} = U_i^n + \sum_{j\in\mathcal{W}(i)} c_{ij}(U_j - U_i), \qquad \text{avec } \forall j,\ c_{ij} \geq 0 \quad \text{et} \quad \sum_{j\in\mathcal{W}(i)} c_{ij} \leq 1\,. \tag{9.56}$$

On remarque que l'on s'attend à une somme sur le voisinage $\mathcal{W}(i)$ plutôt que sur le voisinage $\mathcal{V}(i)$, puisque la procédure de reconstruction implique des éléments appartenant au voisinage $\mathcal{W}(i)$.

9.4.2.2 Réécriture du terme $U_{ij} - U_i$

Comme expliqué dans la thèse de CLAUZON [46], la stratégie classique afin d'obtenir un coefficient positif pour ce terme consiste à prouver une propriété d'inversion de signe, telle que

$$\begin{aligned} U_{ij} - U_i &= \sum_{k\in\mathcal{W}(i)} \omega_{ijk}(U_i - U_k)\,, \\ \forall K_i \in \Omega,\ \forall j \in \mathcal{V}(i),\ \forall k \in \mathcal{W}(i), &\qquad \omega_{ijk} \geq 0 \quad \text{et} \quad \sum_{k\in\mathcal{W}(i)} \omega_{ijk} \leq C_\infty\,, \end{aligned} \tag{9.57}$$

où C_∞ est une constante. Pour cela, réécrivons ce terme en utilisant les différentes relations obtenues dans les paragraphes précédents, et en introduisant les paramètres géométriques :

$$\eta_{ij}^{-} = \frac{\|\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{H}_{ij}^{-}\|}{\|\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{M}_{ij}\|}\,, \qquad \eta_{ij}^{+} = \frac{\|\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{H}_{ij}^{+}\|}{\|\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{M}_{ij}\|}\,. \tag{9.58}$$

On remarque que ces paramètres prennent la valeur 2 dans le cas d'un maillage structuré à pas constant. On note ensuite $\varphi_{ij} = \varphi(r_{ij}, \mathcal{G}_{ij})$, et en utilisant les relations (9.13) et (9.15), nous pouvons écrire

$$U_{ij} - U_i = \|\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{M}_{ij}\| p_{ij}^{+}\varphi_{ij} = \|\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{M}_{ij}\|\frac{p_{ij}^{-}}{r_{ij}}\varphi_{ij} = \frac{\varphi_{ij}}{\eta_{ij}^{-} r_{ij}}(U_i - U_{H_{ij}^{-}})\,. \tag{9.59}$$

D'après les relations (9.19) à (9.24), il est possible d'écrire de manière générique pour les formalismes 2D et 3D, avec respectivement $d = 2$ ou $d = 3$:

$$U_{H_{ij}^{-}} = \sum_{l=1}^{d} \beta_{ij_l}^{-} U_{ij_l}^{-}\,, \qquad \sum_{l=1}^{d} \beta_{ij_l}^{-} = 1\,, \tag{9.60}$$

où $U^-_{ij_l}$ est la valeur dans la cellule $K^-_{ij_l}$ appartenant à $\mathcal{W}(i)$. Il vient :

$$U_{ij} - U_i = \frac{\varphi_{ij}}{\eta^-_{ij} r_{ij}} \Big[U_i \sum_{l=1}^{d} \beta^-_{ij_l} - \sum_{l=1}^{d} \beta^-_{ij_l} U^-_{ij_l} \Big] = \frac{\varphi_{ij}}{\eta^-_{ij} r_{ij}} \sum_{l=1}^{d} \beta^-_{ij_l} (U_i - U^-_{ij_l}) \,. \tag{9.61}$$

La notation suivante permet de désigner l'ensemble des voisins sélectionnés en amont :

$$\mathcal{L}^-_{ij} = \left\{ K^-_{ij_l} \mid l \in \mathbb{N},\ 1 \le l \le d \right\} \,. \tag{9.62}$$

Nous obtenons alors finalement :

$$\boxed{U_{ij} - U_i = \sum_{k \in \mathcal{W}(i)} \omega_{ijk} (U_i - U_k) \,,} \tag{9.63}$$

avec $\omega_{ijk} = \dfrac{\varphi_{ij}}{\eta^-_{ij} r_{ij}} \beta^-_{ij_l}$ si $K_k \in \mathcal{L}^-_{ij}$, et $\omega_{ijk} = 0$ si $K_k \notin \mathcal{L}^-_{ij}$. Ainsi, le coefficient ω_{ijk} est bien positif ou nul si le limiteur est tel que $\varphi_{ij} = 0$ pour $r_{ij} \le 0$, et $\varphi_{ij} \ge 0$ quand $r_{ij} > 0$. De plus, la somme des coefficients s'écrit :

$$\sum_{k \in \mathcal{W}(i)} \omega_{ijk} = \frac{\varphi_{ij}}{\eta^-_{ij} r_{ij}} \,. \tag{9.64}$$

Cette somme sera bornée si le limiteur est correctement construit (cf. § 9.5).

9.4.2.3 Réécriture du terme $U_{ji} - U_i$

D'après la relation (9.14), nous avons

$$U_{ji} = U_j + \|\boldsymbol{B}_j \boldsymbol{M}_{ij}\| p^+_{ji} \varphi_{ji} \,, \tag{9.65}$$

ce qui permet d'écrire

$$U_{ji} - U_i = U_j - U_i + \frac{\|\boldsymbol{B}_j \boldsymbol{M}_{ij}\|}{\|\boldsymbol{B}_j \boldsymbol{H}^+_{ji}\|} \varphi_{ji} (U^+_{H_{ji}} - U_j) \,, \tag{9.66}$$

$$U_{ji} - U_i = (U_j - U_i) \left(1 - \frac{\varphi_{ji}}{\eta^+_{ji}} \right) + (U^+_{H_{ji}} - U_i) \frac{\varphi_{ji}}{\eta^+_{ji}} \,. \tag{9.67}$$

De la même manière que précédemment pour le terme $U_{ij} - U_i$, nous pouvons écrire en utilisant la définition de $U^+_{H_{ji}}$:

$$U^+_{H_{ji}} - U_i = \sum_{l=1}^{d} \beta^+_{ji_l} (U^+_{ji_l} - U_i) \,, \tag{9.68}$$

où $U^+_{ji_l}$ est la valeur dans la cellule $K^+_{ji_l}$ qui appartient à $\mathcal{W}(j)$ par construction. A ce stade, pour les besoins de la démonstration, il est nécessaire d'introduire l'hypothèse suivante :

Hypothèse 1. *Les éléments $K^+_{ji_l}$ sélectionnés pour calculer $U^+_{H_{ji}}$, qui appartiennent au voisinage $\mathcal{W}(j)$ par construction, appartiennent aussi au voisinage $\mathcal{W}(i)$.*

Il est important de préciser que la plupart des maillages usuels, même très irréguliers, respectent cette propriété sans difficulté (voir la figure Figure 9.1 pour s'en convaincre). Dans l'éventualité où ce ne serait pas le cas localement, l'algorithme de détermination des voisins aval peut toujours être modifié pour forcer cette propriété. La notation suivante permet ensuite de désigner l'ensemble des voisins sélectionnés en aval :

$$\mathcal{L}^+_{ji} = \left\{ K^+_{ji_l} \mid l \in \mathbb{N},\ 1 \le l \le d \right\} \,. \tag{9.69}$$

Sous l'Hypothèse 1, nous obtenons

$$(U^+_{H_{ji}} - U_i) \frac{\varphi_{ji}}{\eta^+_{ji}} = \sum_{k \in \mathcal{W}(i)} \lambda_{ijk} (U_k - U_i) \,, \tag{9.70}$$

avec $\lambda_{ijk} = \dfrac{\varphi_{ji}}{\eta^+_{ji}} \beta^+_{ji_l}$ si $K_k \in \mathcal{L}^+_{ji}$, et $\lambda_{ijk} = 0$ si $K_k \notin \mathcal{L}^+_{ji}$. Par conséquent, on montre que le coefficient λ_{ijk} est positif ou nul si le limiteur l'est également. De plus, la somme des coefficients s'écrit :

$$\sum_{k \in \mathcal{W}(i)} \lambda_{ijk} = \frac{\varphi_{ji}}{\eta^+_{ji}} \,. \tag{9.71}$$

Encore une fois, cette somme peut être bornée avec un limiteur construit à dessein. Et l'on obtient finalement le terme $U_{ji} - U_i$ sous la forme :

$$\boxed{U_{ji} - U_i = (U_j - U_i)\left(1 - \frac{\varphi_{ji}}{\eta^+_{ji}}\right) + \sum_{k\in\mathcal{W}(i)} \lambda_{ijk}(U_k - U_i)\,.} \tag{9.72}$$

9.4.2.4 Seconde réécriture du schéma

Introduisons maintenant les expressions des termes $U_{ij} - U_i$ et $U_{ji} - U_i$ dans l'expression (9.55) du schéma volumes finis :

$$\begin{aligned} U_i^{n+1} = U_i^n + \sum_{j\in\mathcal{V}(i)} \Bigg[& \nu^-_{ij}\left(1 - \frac{\varphi_{ji}}{\eta^+_{ji}}\right)(U_j - U_i) \quad + \quad \nu^-_{ij} \sum_{k\in\mathcal{W}(i)} \lambda_{ijk}(U_k - U_i) \\ & - \quad \nu^+_{ij} \sum_{k\in\mathcal{W}(i)} \omega_{ijk}(U_i - U_k) \Bigg]\,. \end{aligned} \tag{9.73}$$

A partir de là, si l'on impose $\nu^-_{ij} = 0$ si $j \in \mathcal{W}(i)$, $j \notin \mathcal{V}(i)$, alors il est possible d'étendre la somme sur j à l'ensemble $\mathcal{W}(i)$ pour le premier terme de la somme. Pour les deux autres termes, les sommes sur j et k peuvent être permutées. En prenant l'exemple du second terme, cela donne :

$$\begin{aligned} \sum_{j\in\mathcal{V}(i)} \nu^-_{ij} \sum_{k\in\mathcal{W}(i)} \lambda_{ijk}(U_k - U_i) &= \sum_{k\in\mathcal{W}(i)} (U_k - U_i)\left(\sum_{j\in\mathcal{V}(i)} \lambda_{ijk}\nu^-_{ij}\right) \\ &= \sum_{j\in\mathcal{W}(i)} (U_j - U_i)\left(\sum_{k\in\mathcal{V}(i)} \lambda_{ikj}\nu^-_{ik}\right)\,. \end{aligned} \tag{9.74}$$

En procédant de la même manière pour le troisième terme, on réécrit le schéma (9.73) comme

$$U_i^{n+1} = U_i^n + \sum_{j\in\mathcal{W}(i)} (U_j - U_i)\left[\nu^-_{ij}\left(1 - \frac{\varphi_{ji}}{\eta^+_{ji}}\right) + \sum_{k\in\mathcal{V}(i)} \left(\omega_{ikj}\nu^+_{ik} + \lambda_{ikj}\nu^-_{ik}\right)\right]. \tag{9.75}$$

Ainsi le schéma s'obtient finalement sous la forme

$$\boxed{U_i^{n+1} = U_i^n + \sum_{j\in\mathcal{W}(i)} c_{ij}\,(U_j - U_i)\,,} \tag{9.76}$$

et les coefficients c_{ij} s'écrivent :

$$\boxed{c_{ij} \;=\; \nu^-_{ij}\left(1 - \frac{\varphi_{ji}}{\eta^+_{ji}}\right) + \sum_{k\in\mathcal{V}(i)} \left(\omega_{ikj}\nu^+_{ik} + \lambda_{ikj}\nu^-_{ik}\right).} \tag{9.77}$$

9.4.2.5 Positivité et majoration des coefficients

Comme mentionné dans la relation (9.54), les coefficients ν^-_{ij} et ν^+_{ij} sont positifs ou nuls. De plus, si la fonction limiteur est telle que

$$\forall K_i \in \Omega,\ \forall j \in \mathcal{V}(i),\ \varphi_{ij} \in [0, \eta^+_{ij}]\,, \tag{9.78}$$

alors on obtient la positivité des coefficients c_{ij}. Écrivons à présent la somme des coefficients :

$$\sum_{j\in\mathcal{W}(i)} c_{ij} = \sum_{j\in\mathcal{W}(i)} \nu^-_{ij}\left(1 - \frac{\varphi_{ji}}{\eta^+_{ji}}\right) + \sum_{j\in\mathcal{W}(i)} \sum_{k\in\mathcal{V}(i)} \left(\omega_{ikj}\,\nu^+_{ik} \;+\; \lambda_{ikj}\,\nu^-_{ik}\right), \tag{9.79}$$

$$\sum_{j\in\mathcal{W}(i)} c_{ij} = \sum_{j\in\mathcal{W}(i)} \nu^-_{ij}\left(1 - \frac{\varphi_{ji}}{\eta^+_{ji}}\right) + \sum_{j\in\mathcal{V}(i)} \left[\nu^+_{ij}\left(\sum_{k\in\mathcal{W}(i)} \omega_{ijk}\right) \;+\; \nu^-_{ij}\left(\sum_{k\in\mathcal{W}(i)} \lambda_{ijk}\right)\right]. \tag{9.80}$$

En utilisant les relations (9.64) et (9.71), et puisque $\nu_{ij}^- = 0$ si $j \in \mathcal{W}(i)$, $j \notin \mathcal{V}(i)$, nous obtenons :

$$\sum_{j\in\mathcal{W}(i)} c_{ij} = \sum_{j\in\mathcal{V}(i)} \nu_{ij}^- \left(1 - \frac{\varphi_{ji}}{\eta_{ji}^+}\right) + \sum_{j\in\mathcal{V}(i)} \left(\nu_{ij}^+ \frac{\varphi_{ij}}{\eta_{ij}^- r_{ij}} + \nu_{ij}^- \frac{\varphi_{ji}}{\eta_{ji}^+}\right) . \tag{9.81}$$

Et la somme des coefficients s'écrit finalement :

$$\boxed{\sum_{j\in\mathcal{W}(i)} c_{ij} = \sum_{j\in\mathcal{V}(i)} \left(\nu_{ij}^- + \nu_{ij}^+ \frac{\varphi_{ij}}{\eta_{ij}^- r_{ij}}\right) .} \tag{9.82}$$

A ce stade, nous savons que la stabilité du schéma est conditionnée par une majoration de la somme des coefficients par 1. En effet, U_i^{n+1} est dans ce cas le résultat d'une combinaison convexe de valeurs appartenant au voisinage $\mathcal{W}(i)$. Et donc le principe du maximum local écrit en (9.11) est respecté, en considérant que le voisinage par sommets $\mathcal{W}$ est le voisinage $\mathcal{U}$ de la Définition 1. On introduit ensuite $N_i = \text{card}[\mathcal{V}(i)]$, c'est-à-dire le nombre de faces de la cellule K_i. Il vient alors deux conditions suffisantes de stabilité à partir de la relation (9.82) :

$$\forall K_i \in \Omega,\ \forall j \in \mathcal{V}(i),\ \text{si}\ \ \nu_{ij}^- \leq \frac{1}{2N_i},\ \text{et si}\ \ \nu_{ij}^+ \frac{\varphi_{ij}}{\eta_{ij}^- r_{ij}} \leq \frac{1}{2N_i},\ \text{alors}\ \sum_{j\in\mathcal{V}(i)} c_{ij} \leq 1 . \tag{9.83}$$

Les paramètres suivants sont ensuite introduits :

$$N = \max_{K_i\in\Omega} N_i,\ \ h_0 = \min_{\substack{K_i\in\Omega \\ j\in\mathcal{V}(i)}} \frac{|K_i|}{|S_{ij}|},\ \ M = \max_{\substack{K_i\in\Omega \\ j\in\mathcal{V}(i) \\ t\in[0,T]}} \left[\frac{\partial\phi_{ij}}{\partial U_1}\left(\widetilde{U_{ij}}, U_i\right), -\frac{\partial\phi_{ij}}{\partial U_2}\left(U_{ij}, U_{ij}^\star\right)\right] . \tag{9.84}$$

De plus, on note $\nu_{max} = \Delta t M/h_0$ le nombre CFL maximum atteint au cours du calcul, qui majore donc tous les coefficients ν_{ij}^- et ν_{ij}^+ :

$$\forall K_i \in \Omega,\quad \forall j \in \mathcal{V}(i),\quad \forall t \in [0,T],\quad \nu_{ij}^- \leq \nu_{max},\quad \nu_{ij}^+ \leq \nu_{max} . \tag{9.85}$$

La première condition de la relation (9.83) est donc contenue dans la condition suffisante uniforme :

$$\nu_{max} \leq \frac{1}{2N} . \tag{9.86}$$

Cette condition suffisante peut être reformulée en une condition sur le pas de temps :

$$\Delta t \leq \frac{h_0}{2MN} . \tag{9.87}$$

La seconde condition suffisante de la relation (9.83) conduit à une condition sur le limiteur :

$$\varphi_{ij} \leq \frac{\eta_{ij}^- r_{ij}}{2N_i \nu_{ij}^+} . \tag{9.88}$$

Dès lors, on peut conserver cette condition telle quelle, ce qui va engendrer une fonction limiteur dépendante du nombre CFL local. Ou bien, en utilisant le fait que $2N_i\nu_{ij}^+ \leq 1$, on établit une autre condition suffisante :

$$\varphi_{ij} \leq \eta_{ij}^- r_{ij} . \tag{9.89}$$

Cette dernière condition va générer une fonction limiteur plus classique car indépendante du nombre CFL. A noter que la condition (9.88) est moins restrictive que la condition (9.89). Par conséquent, on attend des limiteurs dépendants du nombre CFL qu'ils soient moins dissipatifs que les limiteurs indépendants du nombre CFL.

9.4.2.6 Résumé de la démonstration de stabilité L^∞

Résumons ici les résultats démontrés précédemment sous la forme d'une proposition.

Proposition 2. *Sous les hypothèses formulées à propos des flux physique et numérique en § 9.4.2.1, et sous l'Hypothèse 1 concernant la procédure de sélection des voisins aval, le schéma MUSCL volumes finis* (9.10)

basé sur la reconstruction multipente respecte le principe du maximum local (PML) (cf. Définition 1), et est donc L^∞-stable, sous la condition suffisante de stabilité sur le pas de temps :

$$\boxed{\Delta t \leq \frac{h_0}{2MN}\,,} \tag{9.90}$$

et sous la condition suffisante suivante sur la fonction limiteur :

$$\boxed{0 \leq \varphi_{ij} \leq \min\left(\eta_{ij}^{+}, \frac{\eta_{ij}^{-} r_{ij}}{2N_i \nu_{ij}^{+}}\right),} \tag{9.91}$$

dans laquelle est contenue une condition plus restrictive, indépendante du nombre CFL :

$$\boxed{0 \leq \varphi_{ij} \leq \min\left(\eta_{ij}^{+}, \eta_{ij}^{-} r_{ij}\right).} \tag{9.92}$$

Évidemment, il ne s'agit que de conditions suffisantes, aussi des pas de temps plus élevés peuvent être utilisés en pratique, sans pour autant rendre le schéma instable. De même, on peut envisager d'étendre la borne supérieure des limiteurs, notamment en intégrant un coefficient multiplicateur $k > 1$ de la manière suivante :

$$0 \leq \varphi_{ij} \leq \min\left(\eta_{ij}^{+}, \frac{\eta_{ij}^{-} r_{ij} k}{2N_i \nu_{ij}^{+}}\right). \tag{9.93}$$

Selon les cas, il doit exister des valeurs $k > 1$ qui permettent de réduire la dissipation du schéma, tout en préservant $\sum c_{ij} \leq 1$ et donc la stabilité. Cependant, nous ne développerons pas davantage cette idée ici, et nous gardons $k = 1$ pour la suite. Finalement, en gardant à l'esprit que la consistance d'ordre 2 démontrée en § 9.4.1 implique que le limiteur vérifie la propriété :

$$\text{si } \; r_{ij} = 1 \; \text{ alors } \; \varphi_{ij} = 1\,, \tag{9.94}$$

alors il apparait que la construction d'un limiteur globalement le mieux adapté repose sur la meilleure combinaison entre cette dernière propriété (qui indique la forme optimale du limiteur pour des solutions régulières, c'est-à-dire telles que $r_{ij} \approx 1$), et les bornes de la région de stabilité (qui indiquent la forme optimale du limiteur pour les solutions à forts gradients, c'est-à-dire telles que $r_{ij} \ll 1$ et $r_{ij} \gg 1$). C'est précisément l'objectif du paragraphe suivant.

9.5 Construction de limiteurs performants

Bien qu'appliquée à un maillage non structuré multidimensionnel, l'étape de limitation dans la méthode multipente se réduit en quelque sorte au traitement d'une configuration de maillage 1D à pas variable. Or, il existe une littérature très vaste sur les limiteurs de pentes monodimensionnels. Il est donc possible de s'en inspirer afin de développer des limiteurs pour la méthode multipente adaptés à la zone de stabilité mise en évidence dans la démonstration du paragraphe précédent.

Les limiteurs de pente introduits ci-dessous sont donc basés sur des limiteurs classiques. Cependant, il est bien connu qu'il n'existe pas de limiteur optimal. Certains limiteurs sont performants pour capturer les discontinuités mais sont responsables d'un effet de "squaring" (transformation d'un signal sinusoidal en un créneau). C'est typiquement le cas du limiteur Superbee. A l'inverse, d'autres limiteurs sont plus précis sur les solutions régulières mais en contrepartie beaucoup plus dissipatifs en présence de forts gradients. C'est le cas notamment des limiteurs Monotonized Central et Van Leer Harmonic.

Des travaux ont été entrepris dans la littérature pour intégrer le nombre CFL aux limiteurs (ARORA et ROE [9]), pour étendre les limiteurs classiques aux maillages monodimensionnels à pas variable (BERGER et al. [19]), ou bien pour combiner plusieurs limiteurs entre eux (KEMM [158], WATERSON et DECONINCK [298]). Cependant, aucune formulation ne semble faire consensus. C'est pourquoi nous proposons ici une stratégie pour construire un limiteur bien adapté, en combinant deux limiteurs "pivots" bien choisis. Les limiteurs pivots que nous introduisons sont dépendants du nombre CFL, toutefois des variantes indépendantes du nombre CFL peuvent être obtenues simplement, et utilisées par exemple en cas d'intégration temporelle implicite.

9.5.1 Limiteurs pivots dépendants du nombre CFL

Commençons par introduire deux limiteurs pivots, dérivés de limiteurs classiques, mais adaptés aux maillages irréguliers et prenant en compte le nombre CFL. Ces limiteurs sont définis à l'intérieur de la zone de stabilité établie en (9.91). A noter qu'aucun de ces limiteurs ne vérifie la propriété de symétrie [1], laquelle parait incompatible avec l'introduction du nombre CFL et le stencil irrégulier.

Limiteur CFL-Superbee

Le limiteur CFL-Superbee est défini comme

$$\varphi_{v\text{-}Sup}(r_{ij}, \eta^+_{ij}, \eta^-_{ij}, \nu^+_{ij}, N_i) = \max\left[0, \min\left(\frac{\eta^-_{ij} r_{ij}}{2N_i \nu^+_{ij}}, 1\right), \min\left(r_{ij}, \eta^+_{ij}\right)\right]. \tag{9.95}$$

Il s'agit du limiteur le plus performant pour les solutions présentant des discontinuités, c'est-à-dire pour $r_{ij} \ll 1$ ou $r_{ij} \gg 1$, puisqu'il suit strictement la borne supérieure de la zone de stabilité. De plus, il respecte la propriété $\varphi_{v\text{-}Sup}(1) = 1$, cependant sa forme autour de $r_{ij} = 1$ n'est pas optimale. En effet, le changement brusque de pente, qui correspond au passage entre deux schémas linéaires différents, est responsable de l'effet de "squaring". Cet effet se caractérise par la tendance à transformer une onde sinusoïdale en un créneau, et est classiquement observé avec le limiteur Superbee (WATERSON et DECONINCK [298]). Une version indépendante du nombre CFL est obtenue en posant simplement $1/(2N_i\nu^+_{ij}) = 1$. On retrouve alors la forme classique du limiteur Superbee pour maillages irréguliers.

Limiteur CFL-ordre 3

Ce limiteur est défini comme suit :

$$\varphi_{v\text{-}o3}(r_{ij}, \eta^+_{ij}, \eta^-_{ij}, \nu^+_{ij}, N_i) = \max\left(0, \min\left[\varphi_{v\text{-}Sup}, 1 + \frac{1+\nu^+_{ij}}{3}\left(r_{ij} - 1\right)\right]\right). \tag{9.96}$$

Il s'agit du limiteur d'ordre 3 tel que défini dans KEMM [158], mais limité par le limiteur CFL-Superbee (cf. Figure 9.4). Il est construit selon une pondération des schémas Lax-Wendroff et Beam-Warming. Plus la valeur du nombre CFL est grande, plus le poids donné au schéma de Beam-Warming par rapport au schéma de Lax-Wendroff est important (KEMM [158]). De cette manière, ce limiteur se révèle très précis pour les solutions régulières, c'est-à-dire pour $r_{ij} \approx 1$.

Par ailleurs, pour certaines valeurs de ν^+_{ij}, le limiteur CFL-ordre 3 est équivalent à certains limiteurs classiques basés sur des κ-schémas dans la zone $r_{ij} \approx 1$. Ainsi, si l'on considère la classe générale des κ-schémas linéaires s'écrivant sous la forme (WATERSON et DECONINCK [298]) [2]

$$\varphi_\kappa(r_{ij}) = \frac{1}{2}\left[(1-\kappa)r_{ij} + (1+\kappa)\right], \tag{9.97}$$

alors dans la zone ($r_{ij} \approx 1$), $\varphi_{v\text{-}o3}(\nu^+_{ij} = 0)$ est équivalent au schéma linéaire Cubic-Upwind, défini par $\kappa = \frac{1}{3}$, sur lequel est basé le limiteur de Koren [3]. De même, $\varphi_{v\text{-}o3}(\nu^+_{ij} = 0.5)$ est équivalent au schéma linéaire de Fromm, défini par $\kappa = 0$, et sur lequel est basé le limiteur Monotonized Central.

9.5.2 Génération d'un limiteur hybride

Nous introduisons maintenant une manière de générer un limiteur hybride, construit à partir de deux limiteurs pivots. L'idée essentielle est de combiner les performances des limiteurs les plus compressifs dans les zones à forts gradients, avec les performances du schéma d'ordre 3 dans la zone régulière. Pour cela, nous utilisons une fonction "switch" inspirée d'une idée de HARTEN [132]. Nous omettons à présent les indices ij dans un souci d'alléger les notations. En distinguant les deux intervalles $r \in [0, 1[$ et $r \in [1, +\infty[$, la fonction switch s'écrit :

$$h(r) = \begin{cases} \left[1 - \tanh\left(a\, r^b\right)\right]\left(1 - r\right)^c & \text{si} \quad 0 < r < 1 \\ \\ \left(\tanh\left[d\,(r-1)^e\right]\right)^f & \text{si} \quad r \geq 1 \end{cases}. \tag{9.98}$$

1. Dans le contexte monodimensionnel classique, un limiteur est dit symétrique s'il vérifie la relation : $\varphi(r) = r\varphi(1/r)$

2. On trouve dans WATERSON et DECONINCK [298] l'expression des κ-schémas sous la forme $\varphi_\kappa(r_{ij}) = \frac{1}{2}\left[(1+\kappa)r_{ij} + (1-\kappa)\right]$. Ceci est du au fait que le rapport des pentes r_{ij} y est défini de manière inverse à la définition (9.12) que nous avons retenue.

3. Dans LE TOUZE et al. [169], il est indiqué à tort que le limiteur CFL-ordre 3 est équivalent au limiteur de Koren pour une valeur de $\nu^+_{ij} = 1$. Cette erreur vient de la confusion quant à la définition des κ-schémas dans WATERSON et DECONINCK [298] (définition inverse du rapport des pentes r_{ij}).

Nous utilisons ainsi la fonction tangente hyperbolique et plusieurs paramètres a, b, c, d, e et f, dont la valeur reste à préciser. En omettant désormais la dépendance des limiteurs aux paramètres géométriques, le limiteur hybride est obtenu par la combinaison convexe de deux limiteurs pivots φ_1 et φ_2 :

$$\varphi(r) = [1 - h(r)]\ \varphi_1(r)\ +\ h(r)\,\varphi_2(r)\,. \tag{9.99}$$

Les limiteurs CFL-ordre 3 et CFL-Superbee sont alors respectivement choisis comme limiteurs pivots $\varphi_1(r)$ et $\varphi_2(r)$:

$$\begin{aligned} \varphi_1 &= \varphi_{v\text{-}o3}\,, \\ \varphi_2 &= \varphi_{v\text{-}Sup}\,. \end{aligned} \tag{9.100}$$

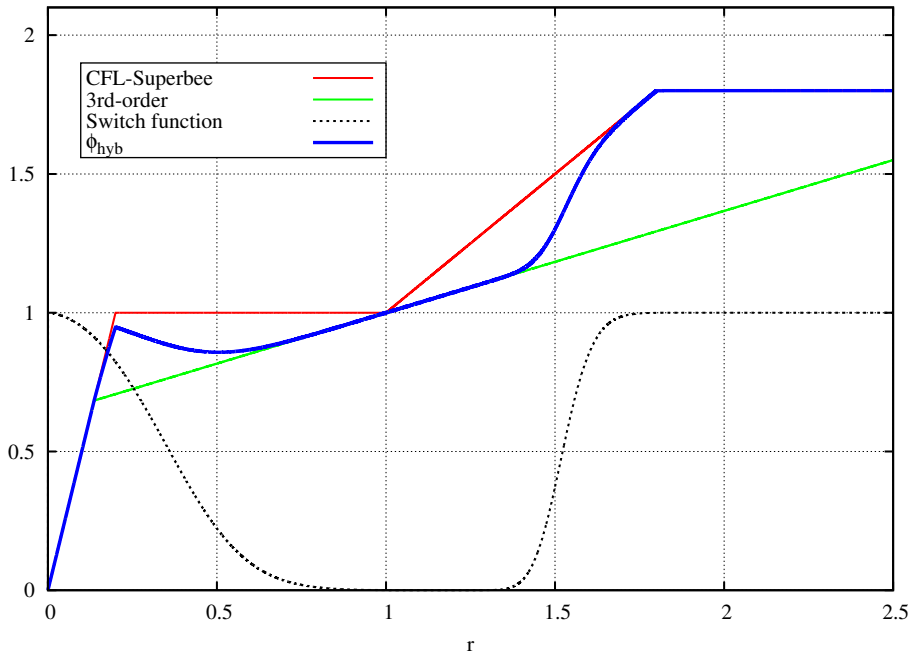


FIGURE 9.4 – ***Fonction switch, limiteurs pivots et limiteur hybride.***

Le limiteur hybride est compris entre les deux limiteurs pivots puisque la fonction switch $h(r)$ est comprise dans l'intervalle $[0, 1]$. Et c'est la valeur des différents paramètres qui détermine la façon dont le limiteur hybride évolue d'un limiteur pivot à l'autre. Avec cette manière de procéder, on note que la pente du limiteur hybride est contrôlée par la pente du limiteur pivot φ_2 en $r \to 0^+$, et par celle du limiteur φ_1 pour $r \approx 1$. En effet, nous avons d'après (9.99) :

$$\varphi'(r)\ =\ \varphi_1'(r)\ +\ h'(r)\Big[\varphi_2(r) - \varphi_1(r)\Big]\ +\ h(r)\Big[\varphi_2'(r) - \varphi_1'(r)\Big]\,. \tag{9.101}$$

De plus, $h(0) = 1$, $\varphi_1(0) = \varphi_2(0) = 0$. Ainsi la dérivée en 0^+ s'écrit

$$\varphi'(0)\ =\ \varphi_1'(0)\ +\ \varphi_2'(0) - \varphi_1'(0)\ =\ \varphi_2'(0)\,. \tag{9.102}$$

Pour ce qui est de la dérivée en $r = 1$, nous avons $h(1) = 0$ et $\varphi_1(1) = \varphi_2(1) = 1$, et il vient donc bien :

$$\varphi'(1)\ =\ \varphi_1'(1)\ +\ h'(1)\Big[1 - 1\Big]\ +\ 0\ =\ \varphi_1'(1)\,. \tag{9.103}$$

Finalement, nous fixons comme suit les valeurs des paramètres qui déterminent la forme du limiteur hybride :

$$a = 4, \quad b = 2, \quad c = 0.1, \quad d = 10, \quad e = 3, \quad f = 6\,. \tag{9.104}$$

Le limiteur hybride ainsi obtenu est représenté sur la Figure 9.4, pour des valeurs aléatoires des paramètres géométriques, en l'occurrence $\eta_{ij}^- = 3$, $\eta_{ij}^+ = 1.8$, $\nu_{ij}^+ = 0.2$, $N_i = 3$. L'avantage de cette procédure de limitation par rapport à des limiteurs plus classiques est illustrée par les cas-tests numériques présentés dans le paragraphe suivant.

9.6 Cas-tests numériques

9.6.1 Traitement des conditions aux limites

Avant de présenter les cas-tests numériques, il convient d'apporter ici quelques précisions quant au traitement des conditions aux limites. Ce point concerne à la fois le calcul des pentes dans la reconstruction multipente, et le calcul des flux numériques aux interfaces au cours de l'avancement en temps.

Reconstruction multipente

Il est assez simple de comprendre comment la reconstruction multipente peut être affectée par les limites du domaine de calcul. En effet, le nombre d'élements dans le voisinage $\mathcal{W}(i)$ est inévitablement réduit quand l'élément K_i est situé à proximité d'une limite. Par conséquent, il peut y avoir des cas où il n'est pas possible de trouver des voisins corrects pour calculer les pentes amont ou aval pour une face S_{ij} donnée. Lorsque cela se produit, deux choix sont possibles :

- les pentes en question ne sont pas calculées ou bien mises à zéro, ce qui a pour effet de faire dégénérer le schéma à l'ordre 1 pour la face concernée. C'est la manière la plus immédiate et la plus sure de toujours respecter les conditions de stabilité présentées au paragraphe § 9.4.2.
- dans certains cas, on dispose quand même au moins d'un voisin sur les deux ou trois nécessaires (configurations 2D ou 3D). Dans ce cas, il est toujours possible d'utiliser la valeur au centre de cette cellule pour calculer la pente. Une erreur de consistance est commise puisque le voisin n'est pas, a priori, situé strictement sur l'axe $(\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{M}_{ij})$. Cependant, cette erreur peut être négligeable si le seul voisin en question est situé "à proximité" de l'axe. Ça peut par exemple être le cas sur des maillages structurés en proche paroi, où il est intéressant de ne pas dégénérer à l'ordre 1 à tout prix.

Par ailleurs, la procédure multipente est compatible avec le découpage du maillage en sous-domaine et le calcul parallèle. Il faut simplement s'assurer que les informations nécessaires sont correctement échangées aux interfaces entre sous-domaines, par exemple en utilisant des librairies d'échanges MPI. Plus précisément, pour une transparence totale du découpage en sous-domaines, il est indispensable que les interfaces d'échanges prennent en compte la connectivité par sommets (voisinage $\mathcal{W}(i)$) et non la connectivité par faces uniquement (voisinage $\mathcal{V}(i)$).

Calcul des flux numériques pour l'avancement en temps

De manière classique, le cas des volumes de contrôle adjacents aux frontières du domaine est traité en introduisant des cellules fantômes. Pour toute face S_{ij} appartenant à la frontière $\partial\Omega$, on crée la cellule fantôme $\widetilde{K_i}$ relative à K_i, dont le volume est nul, et sur laquelle on impose la condition limite choisie. Ainsi, l'avancement en temps dans le volume de contrôle K_i peut être effectué de la même manière que si K_i était strictement à l'intérieur du domaine de calcul.

9.6.2 Cas-test de rotation 2D

Pour évaluer le comportement de la nouvelle méthode multipente, nous allons commencer par considérer le problème de rotation d'un champ scalaire en 2D :

$$\partial_t u(x,y,t) + \boldsymbol{\lambda}(x,y)\cdot\boldsymbol{\nabla} u(x,y,t) = 0 \qquad (x,y)\in\Omega=[0,1]\times[0,1], \qquad t\in\,]0,T]\ , \tag{9.105}$$

où le champ de vitesse est donné par

$$\boldsymbol{\lambda}(x,y) = (0.5-y \qquad x-0.5)^t\ . \tag{9.106}$$

Deux solutions initiales différentes vont être testées, l'une est discontinue et l'autre régulière (cf. Figure 9.7). Ces solutions initiales $u_0(x,y)$ sont convectées pendant une période $T=2\pi$, et parcourent donc un tour complet du domaine de calcul. Afin d'évaluer la capacité de la méthode à gérer les maillages complètement généraux, six "motifs" de maillage différents sont utilisés et référencés de G_1 à G_6 (voir le Tableau 9.1 et les Figure 9.5 et Figure 9.6). Plusieurs calculs sont effectués sur chaque type de maillage, en augmentant à chaque fois le nombre d'éléments $\mathcal{N}$. Il est ainsi possible de calculer l'erreur des différents schémas et de dresser des comparaisons. Les nombres d'éléments utilisés pour chaque maillage sont reportés dans le Tableau 9.2.

L'objectif ici est d'évaluer la performance de la méthode multipente par rapport au schéma décentré d'ordre 1 et par rapport à une approche monopente classique, ainsi que d'évaluer l'apport de la stratégie de construction des

Maillages	G_1	G_2	G_3	G_4	G_5	G_6
Type	Cartésien	Tri "scottish"	Tri "diagonal"	Tri "non structuré"	Quad	Poly

TABLEAU 9.1 – ***Liste des maillages utilisés.***

Maillage	G_1	G_2	G_3	G_4	G_5	G_6
−−	-	-	-	1758	1642	1871
−	1600	1600	3200	3558	3721	3670
+	6400	6400	12800	7033	7180	7050
++	25600	25600	51200	13720	14884	14404

TABLEAU 9.2 – ***Nombre d'éléments $\mathcal{N}$ pour les maillages G_1 à G_6.***

limiteurs que nous avons introduite. La méthode monopente utilisée est celle qui est intégrée au code CEDRE et qui a été décrite en § 8.3.2. Ainsi, le gradient de maille est calculé par une formule de moindres carrés intégrant le voisinage par faces $\mathcal{V}(i)$. Ensuite, la procédure de limitation directionnelle développée par HAIDER [130] est appliquée. Cette méthode monopente sera nommée "Limited Gradient" dans la suite de ce chapitre, et abrégée en "LG" pour légender les figures.

Nous souhaitons également évaluer l'impact de l'introduction du nombre CFL dans le limiteur. Pour cela, nous utilisons un schéma d'intégration temporel RK2 (cf. § 8.4.2) et choisissons de réaliser tous les calculs avec un nombre CFL maximum de 0,1. Pour ce faire, d'après la définition de ν_{max} en § 9.4.2.5, le pas de temps doit être ajusté selon la relation

$$\Delta t = \nu_{max} \frac{h}{M} , \tag{9.107}$$

où

$$h \approx \sqrt{\frac{|\Omega|}{\mathcal{N}}} = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \tag{9.108}$$

est la taille caractéristique d'un maillage donné (utilisée ici à la place de la taille minimum h_0 définie en § 9.4.2.5), et $|\Omega| = 1$ est l'aire totale du domaine de calcul. De plus, M représente la valeur maximale de la norme du vecteur vitesse, et vaut ici :

$$M = \max_{(x,y)\in\Omega} \|\boldsymbol{\lambda}(x,y)\| \approx 0{,}707 . \tag{9.109}$$

Introduisons ensuite l'erreur en norme L^1, définie comme

$$\epsilon_1 = \sum_{K_i} |K_i| \Big| U_i(t = 2\pi) - U_i(t = 0) \Big| , \tag{9.110}$$

où $U_i(t = 2\pi)$ est la solution discrète au centre de la cellule K_i après une révolution, et $U_i(t = 0)$ est la projection sur le maillage de la solution initiale $u_0(x, y)$, qui peut être vue comme une approximation de la solution exacte au temps $t = 2\pi$. Par ailleurs, on définit l'erreur en norme L^∞ par la formule

$$\epsilon_\infty = \max_{K_i} \Big| U_i(t = 2\pi) - U_i(t = 0) \Big| . \tag{9.111}$$

La norme L^1 renseigne sur l'erreur diffusive globale du schéma, et par conséquent est intéressante à la fois pour les cas discontinu et régulier. En revanche, l'erreur L^∞ n'est intéressante que pour le cas régulier, où elle renseigne sur la perte d'amplitude de la solution transportée. Finalement, il est possible de calculer l'ordre moyen des schémas, noté α, soit en norme L^1 soit en norme L^∞. L'erreur d'un schéma dans une norme n donnée est supposée vérifier la relation

$$\epsilon_n = C_n h^{\alpha_n} , \tag{9.112}$$

où C_n est une constante. Ainsi, les ordres α_n sont obtenus en calculant les pentes des régressions linéaires

$$\log \epsilon_n = \alpha_n \log h + \log C_n , \tag{9.113}$$

qui sont représentées sur les figures introduites dans les paragraphes suivants.

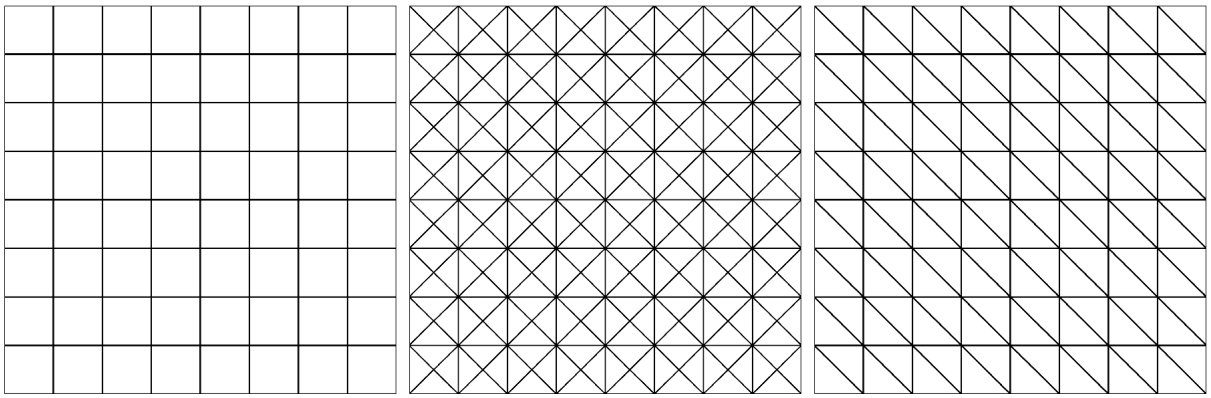


FIGURE 9.5 – ***Motifs de maillage*** G_1, G_2 ***et*** G_3.

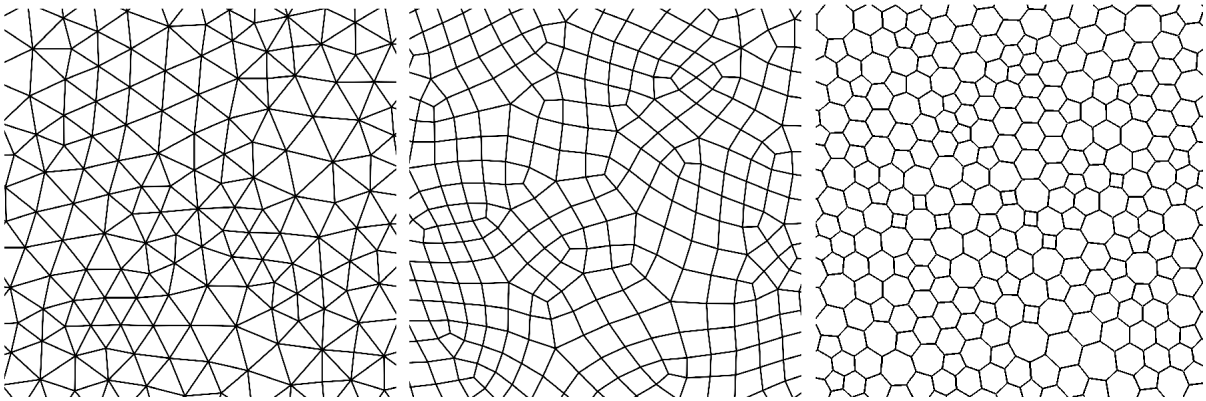


FIGURE 9.6 – ***Motifs de maillage*** G_4, G_5 ***et*** G_6.

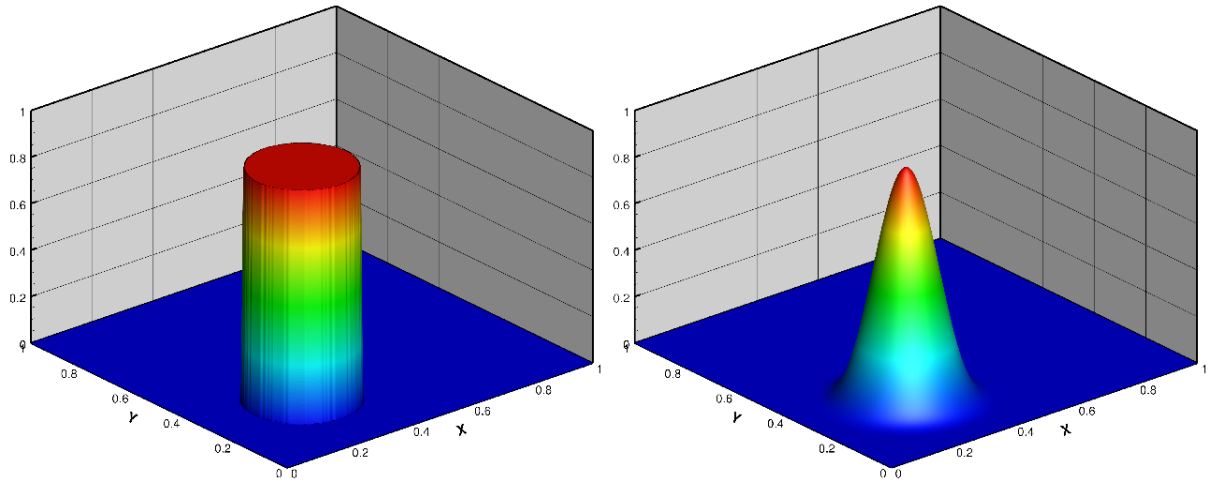


FIGURE 9.7 – ***Représentation des solutions initiales discontinue et régulière dans un repère*** (x, y, u).

Solution initiale discontinue

La solution initiale discontinue est définie par la fonction suivante :

$$u_0(x,y) = \begin{cases} 1 & \text{si} \quad r \leq 0.15 \\ 0 & \text{si} \quad r > 0.15 \end{cases} \qquad \text{avec} \quad r = \sqrt{(x-0.3)^2 + (y-0.3)^2}\,. \tag{9.114}$$

Les résultats pour le cas discontinu, sur les six maillages G_1 à G_6, sont représentés sur les Figure 9.8, Figure 9.9, et Figure 9.10. Des régressions linéaires sont tracées pour l'erreur en norme L^1 en fonction de la taille caractéristique h, pour cinq schémas différents :

- le schéma décentré d'ordre 1 (nommé ***FOU*** pour First Order Upwind sur les figures),
- la méthode monopente (nommée ***LG*** pour Limited Gradient sur les figures),

– la nouvelle méthode multipente (nommée GM pour Generalized Multislope), d'abord associée au limiteur Superbee classique défini par la relation (9.95) où $2N_i\nu_{ij}^+ = 1$ (le schéma est alors nommé ***GM-Sup***),
– puis associée au limiteur CFL-Superbee défini par (9.95), et le schéma est alors nommé ***GM-CFL-Sup***,
– et enfin au limiteur CFL-Hybride défini par les relations (9.98) à (9.104), le schéma étant dans ce cas nommé ***GM-CFL-Hyb***.

A noter qu'à des fins de comparaison, la même échelle est utilisée pour toutes les figures, bien que nous n'ayons pas utilisé les mêmes tailles caractéristiques h pour tous les maillages, comme le montre le Tableau 9.2. L'ordre moyen des différents schémas, dans la norme L^1 et sur les six types de maillage, est fourni dans le Tableau 9.3.

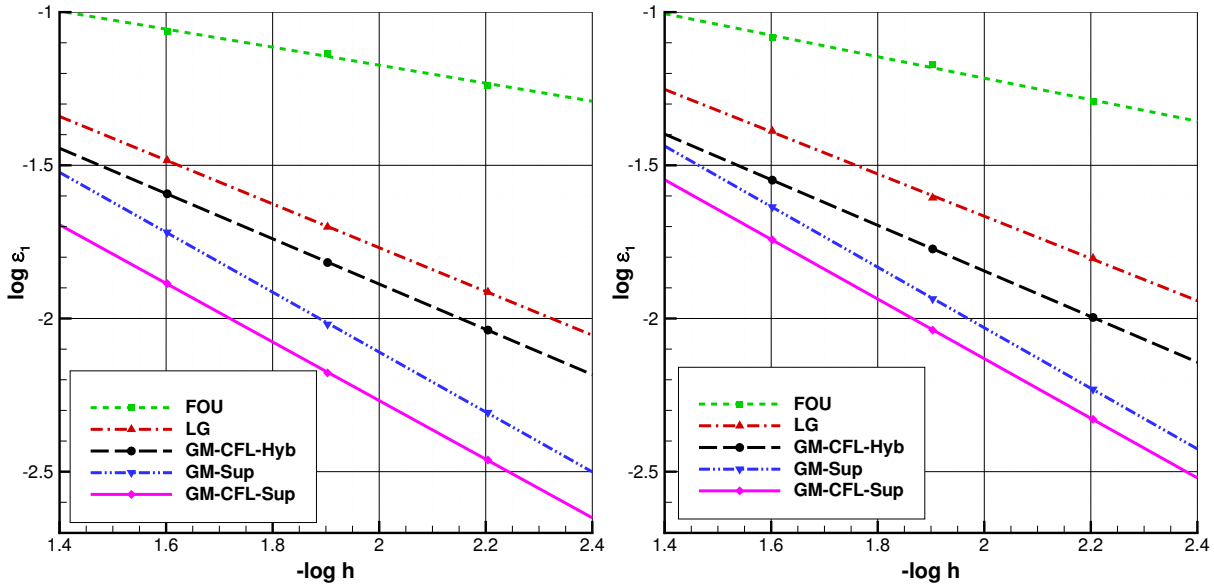


FIGURE 9.8 – ***Erreurs en norme L^1, cas discontinu, maillages G_1 et G_2.***

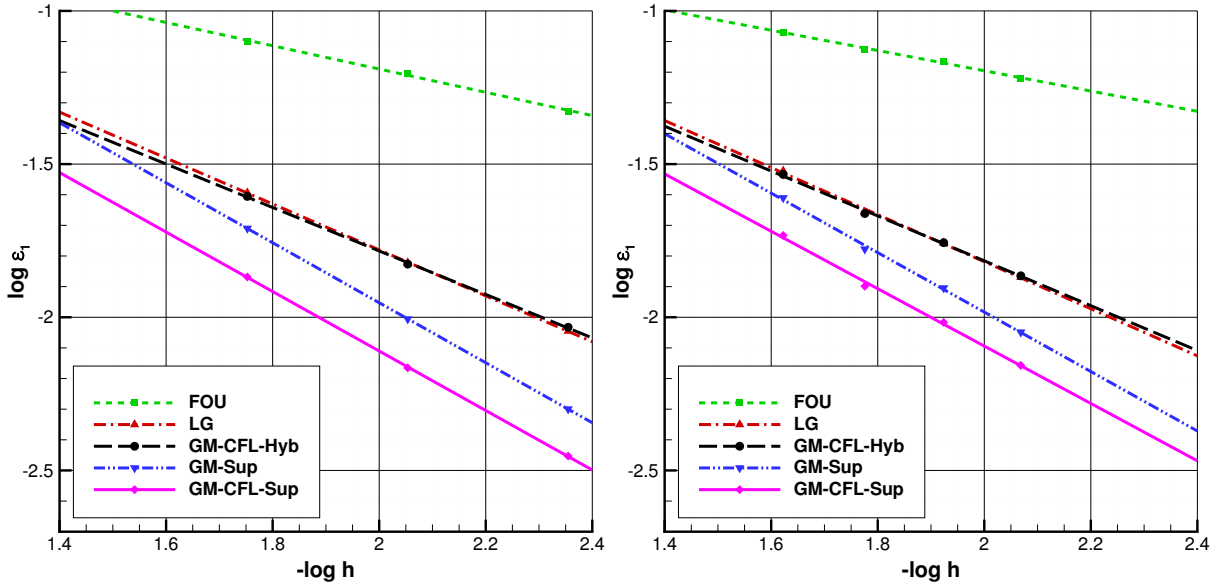


FIGURE 9.9 – ***Erreurs en norme L^1, cas discontinu, maillages G_3 et G_4.***

D'après ces résultats, il est possible de classer les schémas par ordre croissant de précision comme suit : FOU, LG, GM-CFL-Hyb, GM-Sup, GM-CFL-Sup. Il est naturel que les schémas basés sur le limiteur de Superbee soient ici les plus précis, puisque le cas considéré consiste exclusivement à transporter une discontinuité. En effet, leur comportement compressif [4] est bien connu. Par ailleurs, le schéma GM-CFL-Sup est encore plus précis que le

4. Le limiteur Superbee est connu pour avoir tendance à transformer les ondes sinusoïdales en créneaux, phénomène connu sous le nom de "squaring effect".

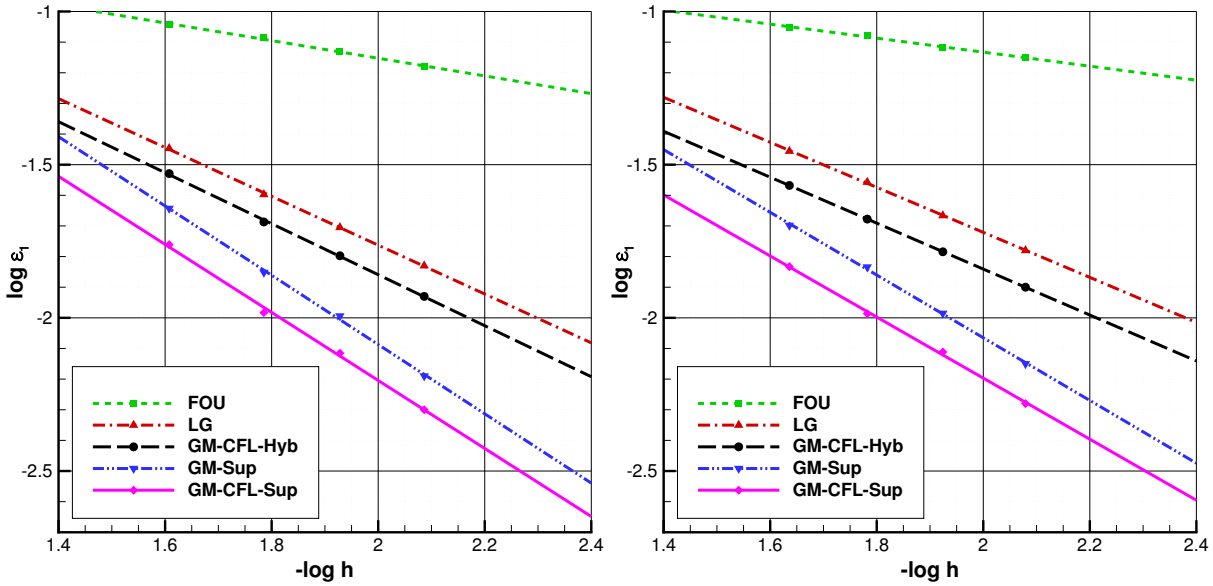


FIGURE 9.10 – *Erreurs en norme L^1, cas discontinu, maillages G_5 et G_6.*

Maillages	G_1	G_2	G_3	G_4	G_5	G_6
FOU	0.294	0.351	0.352	0.328	0.273	0.235
LG	0.714	0.690	0.758	0.723	0.807	0.729
GM-CFL-Hyb	0.739	0.745	0.734	0.694	0.839	0.752
GM-Sup	0.978	0.989	0.983	0.925	1.099	0.996
GM-CFL-Sup	0.957	0.973	0.985	0.883	1.112	0.967

TABLEAU 9.3 – *Ordre moyen des schémas en norme L^1 pour les six maillages. Cas discontinu.*

schéma GM-Sup, ce qui démontre le bénéfice apporté par l'introduction du nombre CFL dans la définition de la borne supérieure de la zone de stabilité du limiteur.

Néanmoins, comme nous l'avons déjà mentionné, les limiteurs de type Superbee ne sont pas de bons candidats dans l'absolu. En effet, ils ne sont pas bien adaptés aux solutions régulières sur lesquelles ils génèrent l'effet de "squaring". C'est pourquoi il est intéressant d'évaluer le comportement du schéma GM-CFL-Hyb, dans la mesure où l'on espère qu'il constitue le meilleur candidat dans le cas général. Or, sa précision s'avère ici supérieure à celle du schéma monopente (LG) sur la plupart des maillages, à l'exception des maillages triangulaires G_3 et G_4 pour lesquels les précisions obtenues sont quasiment équivalentes.

Une explication possible de ce comportement tient dans le fait que plus les éléments du maillage possèdent d'arêtes (donc de voisins), plus la procédure de limitation des gradients est potentiellement restrictive. Dans ce cas, il semble normal que la méthode monopente (LG) soit plus dissipative sur les maillages composés de quadrilatères et d'hexaèdres, que sur les maillages triangulaires. Cependant, on remarque que le maillage G_2, bien qu'il soit également triangulaire, n'offre pas la même précision que les maillages G_3 et G_4 avec le schéma LG. L'explication réside ici probablement dans la courbure du maillage, au sens de l'alignement des points $\boldsymbol{B}_i$, $\boldsymbol{M}_{ij}$ et $\boldsymbol{B}_j$ (cf. Figure 9.1). Alors que la maillage G_3 possède une courbure strictement nulle, et que le maillage G_4 a une courbure très faible, le maillage G_2 possède lui une courbure significative pour deux tiers des faces. Or, la précision des méthodes de gradient est réduite sur les maillages courbés, car les interpolations aux points $\boldsymbol{M}_{ij}$, barycentres des faces, ne sont pas calculées à partir d'une approximation optimale de la dérivée dans la direction $\left(\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{M}_{ij}\right)$.

Solution initiale régulière

La solution initiale régulière est définie par la fonction suivante :

$$u_0(x,y) = \begin{cases} \left[1+\cos(4\pi r)\right]^2/4 & \text{si} \quad r \leq 0.25 \\ 0 & \text{si} \quad r > 0.25 \end{cases} \qquad \text{avec} \quad r = \sqrt{(x-0.3)^2+(y-0.3)^2}\,. \tag{9.115}$$

Les résultats pour ce cas régulier, sur les six maillages G_1 à G_6, sont représentés sur les Figure 9.11, Figure 9.12,

Figure 9.13, Figure 9.14, Figure 9.15, et Figure 9.16. Des régressions linéaires sont tracées pour l'erreur en norme L^1 (figures de gauche) et en norme L^∞ (figures de droite) en fonction de la taille caractéristique h, pour quatre schémas différents :

- le schéma décentré d'ordre 1 (FOU),
- la méthode monopente (LG),
- la nouvelle méthode multipente associée au limiteur classique Monotonized Central (GM-MC),
- la nouvelle méthode multipente associée au limiteur CFL-Hybride (GM-CFL-Hyb), et avec les mêmes paramètres que dans le cas discontinu.

Les ordres moyens des différents schémas, dans les normes L^1 et L^∞, et pour les six types de maillages, sont fournis respectivement dans le Tableau 9.4 et dans le Tableau 9.5.

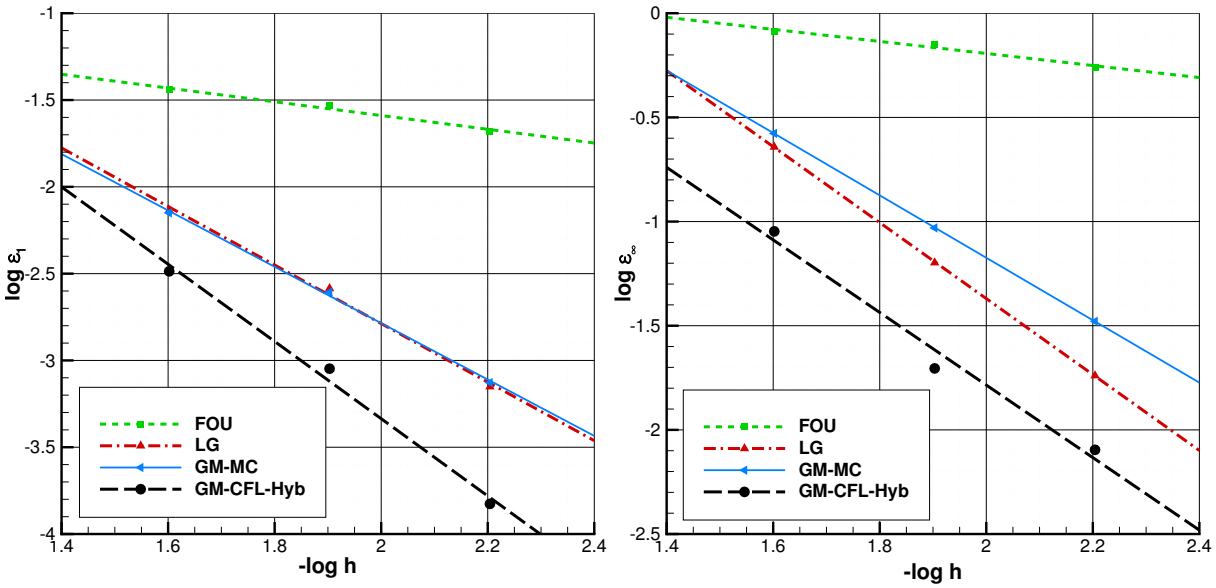


FIGURE 9.11 – ***Erreurs en norme L^1 et L^∞, cas régulier, maillage G_1.***

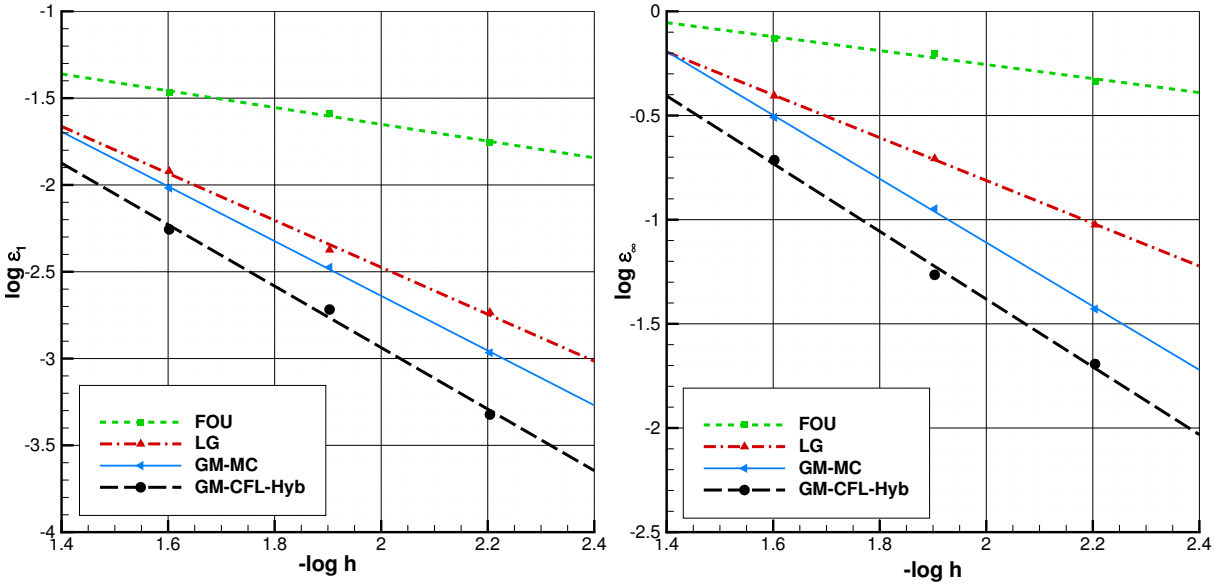


FIGURE 9.12 – ***Erreurs en norme L^1 et L^∞, cas régulier, maillage G_2.***

Les résultats pour l'erreur en norme L^1 révèlent une tendance similaire à celle observée dans le cas discontinu. Ainsi, le schéma GM-CFL-Hyb est le plus précis sur les maillages G_1, G_2, G_5 et G_6, mais est dépassé par le schéma monopente LG sur les maillages G_3 et G_4. En outre, à l'exception des maillages G_3 et G_4, on observe que

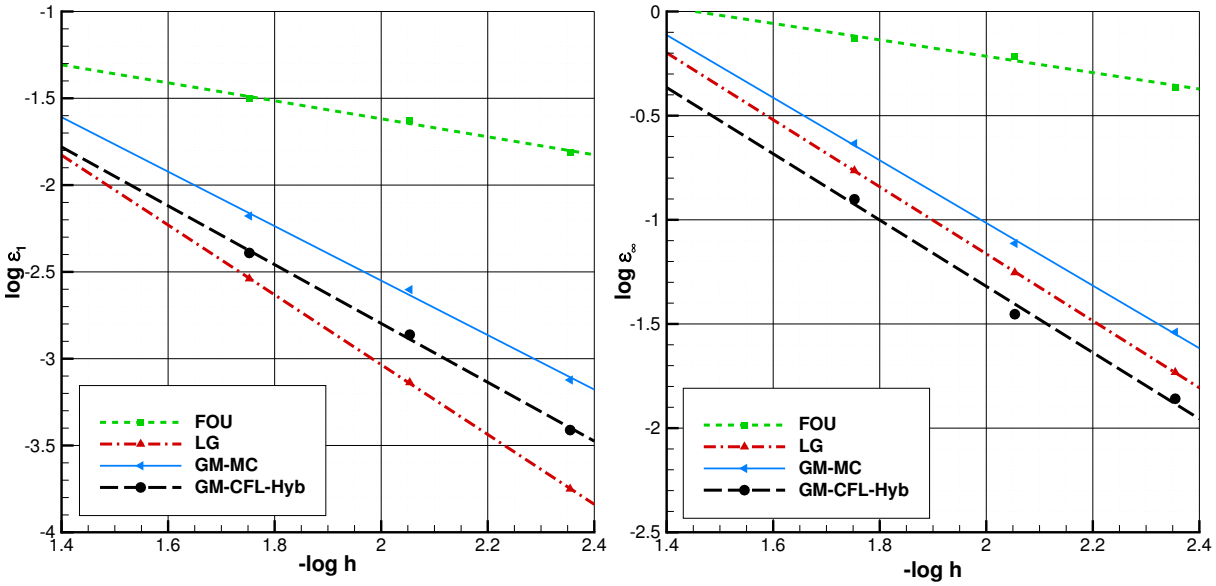


FIGURE 9.13 – ***Erreurs en norme L^1 et L^∞, cas régulier, maillage G_3.***

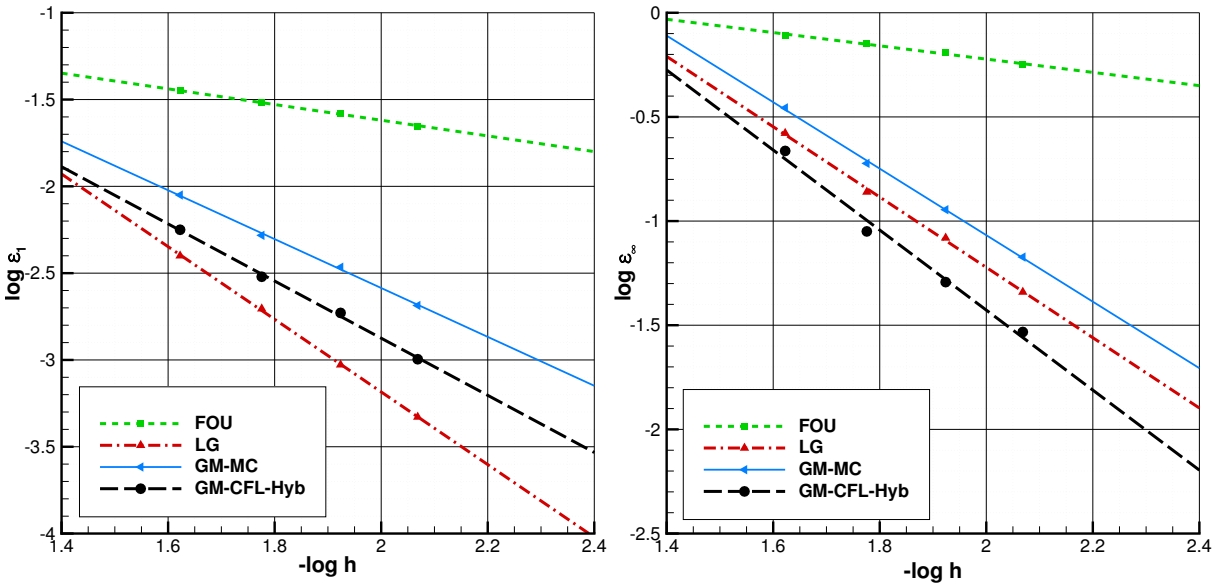


FIGURE 9.14 – ***Erreurs en norme L^1 et L^∞, cas régulier, maillage G_4.***

la méthode multipente simplement associée à un limiteur classique indépendant du nombre CFL comme le limiteur Monotonized Central, possède déjà une précision équivalente à celle du schéma monopente.

De plus, l'erreur en norme L^∞ renseigne sur la capacité des différents schémas à préserver l'amplitude des solutions transportées. Sur ce point, les résultats révèlent la performance supérieure du schéma GM-CFL-Hyb par rapport aux autres schémas. Il est également à noter que la comparaison entre les schémas GM-CFL-Hyb et GM-MC semble montrer l'avantage significatif apporté par la stratégie de construction "hybride" du limiteur. En résumé, les résultats des cas-tests 2D permettent d'établir les conclusions suivantes :

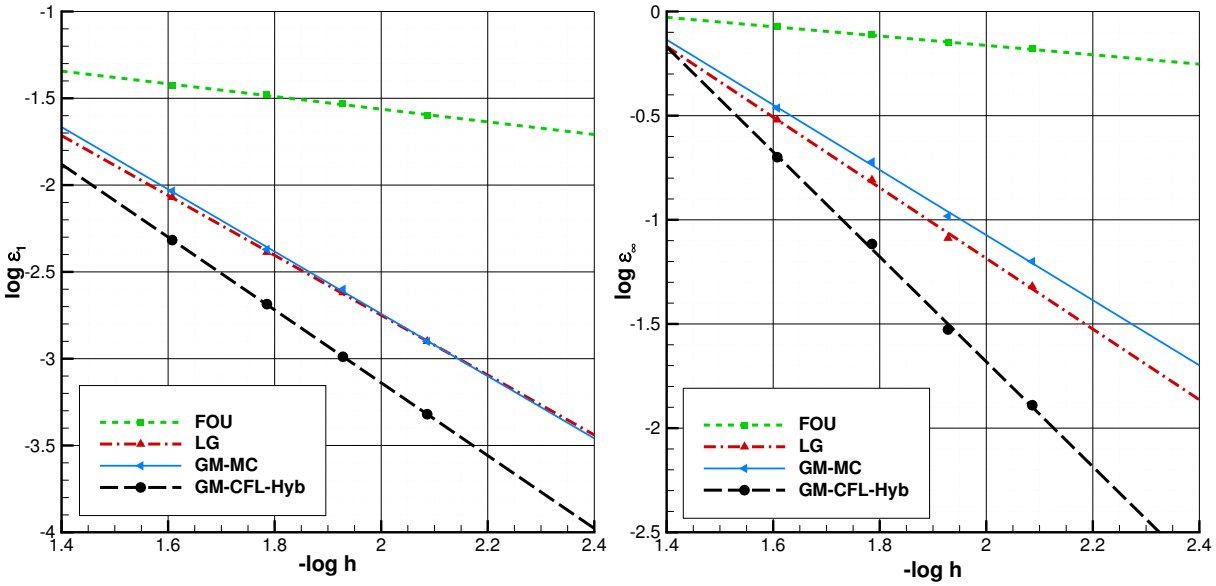


FIGURE 9.15 – ***Erreurs en norme L^1 et L^∞, cas régulier, maillage G_5.***

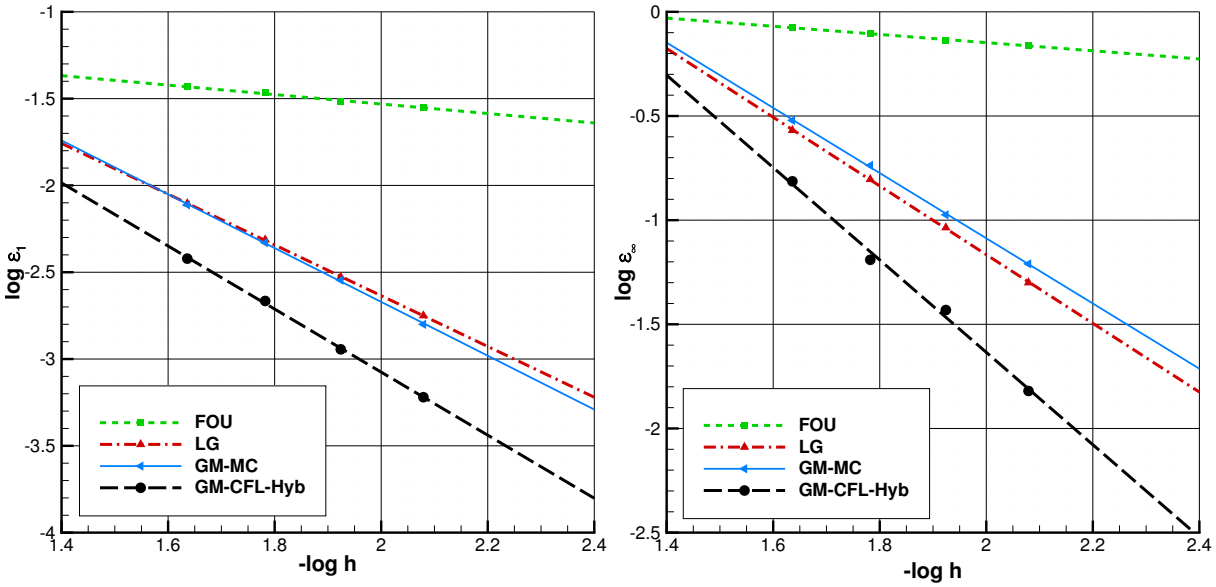


FIGURE 9.16 – ***Erreurs en norme L^1 et L^∞, cas régulier, maillage G_6.***

- La nouvelle méthode multipente n'est pas limitée par la topologie du maillage. Tous les maillages non structurés (ou structurés) peuvent être traités.
- Elle n'est pas affectée par la courbure locale du maillage. L'utilisation d'un stencil élargi permet de tirer profit au maximum du voisinage disponible pour reconstruire les valeurs aux faces.
- Elle fournit une précision supérieure à la méthode monopente testée dans la plupart des cas.
- Les résultats ont également illustré les bénéfices apportés par l'introduction du nombre CFL dans les limiteurs et leur combinaison.

9.6.3 Cas-test 3D

Comme nous l'avons vu en § 9.3, l'algorithme de détermination des points pivots $\boldsymbol{H}_{ij}^{+}$ et $\boldsymbol{H}_{ij}^{-}$ est beaucoup plus complexe en configuration 3D où de nombreuses opérations géométriques sont nécessaires. C'est pourquoi nous présentons ici un cas-test 3D afin de valider le bon fonctionnement de l'algorithme. Le cas considéré est une simple

Maillages	G_1	G_2	G_3	G_4	G_5	G_6
FOU	0.396	0.483	0.518	0.462	0.331	0.292
LG	1.686	1.352	2.011	2.130	1.714	1.471
GM-MC	1.623	1.576	1.569	1.379	1.771	1.505
GM-CFL-Hyb	2.225	1.771	1.694	1.622	2.096	1.813

TABLEAU 9.4 – ***Ordre moyen des schémas en norme L^1 pour les six maillages. Cas régulier.***

Maillages	G_1	G_2	G_3	G_4	G_5	G_6
FOU	0.201	0.200	0.309	0.319	0.198	0.185
LG	1.620	0.850	1.517	1.688	1.617	1.600
GM-MC	1.348	1.273	1.409	1.596	1.480	1.517
GM-CFL-Hyb	1.851	1.497	1.613	1.921	2.297	2.184

TABLEAU 9.5 – ***Ordre moyen des schémas en norme L^∞ pour les six maillages. Cas régulier.***

extension en trois dimensions du cas 2D précédent. Il s'agit d'un problème de rotation tel que

$$\partial_t u(x,y,z,t) + \boldsymbol{\lambda}(x,y,z)\cdot\boldsymbol{\nabla} u(x,y,z,t) = 0 \qquad (x,y,z)\in\Omega=[0,1]^3, \qquad t\in\,]0,T]\ . \tag{9.116}$$

Le champ de vitesse s'écrit

$$\boldsymbol{\lambda}(x,y,z) = \begin{pmatrix} 0.5-y & x-0.5 & (x-y)/2 \end{pmatrix}^t . \tag{9.117}$$

La solution initiale est régulière et définie par

$$u_0(x,y,z) = \begin{cases} \left[1+\cos(4\pi r)\right]^2/4 & \text{si} \quad r\le 0.15 \\ 0 & \text{si} \quad r>0.15 \end{cases} , \tag{9.118}$$

$$r = \sqrt{(x-0.2)^2+(y-0.2)^2+(z-0.2)^2}\ . \tag{9.119}$$

Cette solution initiale est transportée pendant une révolution complète, correspondant à une durée $T = 2\pi$. La solution initiale et sa trajectoire sont représentées sur la Figure 9.18. Comme pour les cas 2D, on utilise un schéma d'intégration temporelle explicite, en l'occurrence le schéma RK2. Le pas de temps est fixé à $\Delta t = T/2000 = \pi/1000$ s. Le maillage utilisé est composé d'hexaèdres non structurés, et il est représenté sur la Figure 9.17. La taille caractéristique du maillage est définie comme

$$h \approx \left(\frac{|\Omega|}{\mathcal{N}}\right)^{1/3} \approx 0.017 \text{ m}\,, \tag{9.120}$$

où $|\Omega| = 1$ est le volume du domaine de calcul, et $\mathcal{N} \approx 215\,000$ est le nombre d'éléments du maillage. Le nombre CFL maximal correspondant vaut

$$\nu_{max} = M\frac{\Delta t}{h} \approx 0.16\,, \tag{9.121}$$

avec

$$M = \max_{(x,y,z)\in\Omega} \|\boldsymbol{\lambda}(x,y,z)\| \approx 0.866\,. \tag{9.122}$$

	FOU	**LG**	**GM-CFL-Hyb**
$\boldsymbol{\epsilon_1}$	$5.93\cdot10^{-3}$	$2.61\cdot10^{-3}$	$2.24\cdot10^{-3}$
$\boldsymbol{\epsilon_\infty}$	0.943	0.528	0.509
valeur max	0.0664	0.527	0.652

TABLEAU 9.6 – ***Erreurs en normes L^1 et L^∞ pour le cas 3D.***

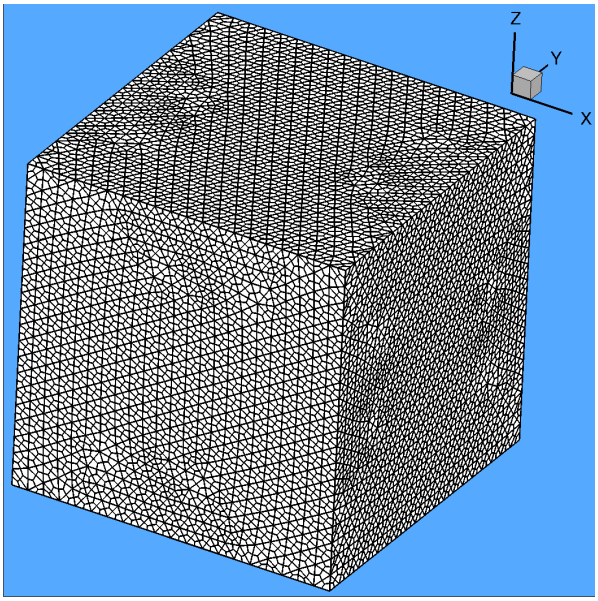


FIGURE 9.17 – *Maillage 3D hexahèdrique.*

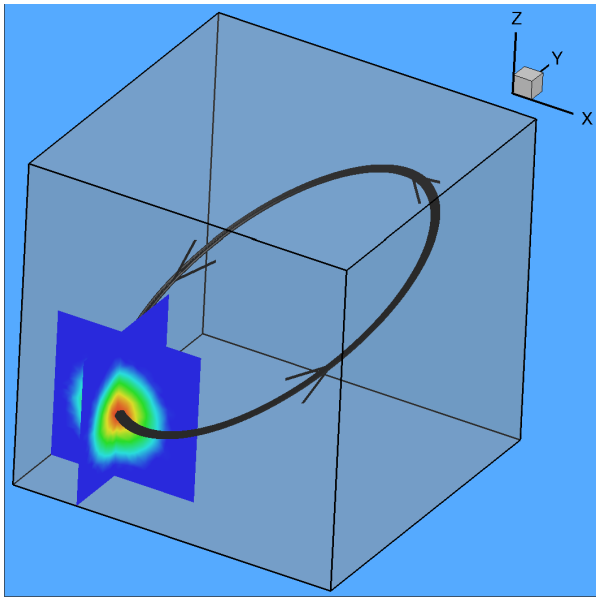


FIGURE 9.18 – *Trajectoire de la solution initiale.*

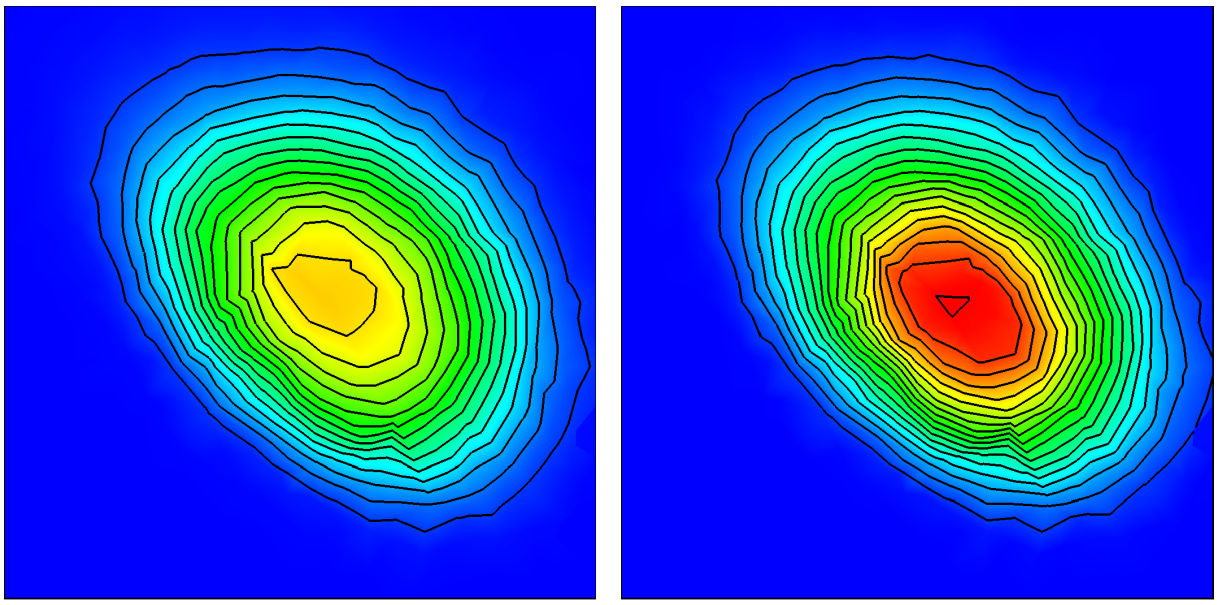


FIGURE 9.19 – *Solution finale dans le plan* (XY) *avec les schémas LG (gauche) et GM-CFL-Hyb (droite).*

Les erreurs en normes L^1 et L^∞ telles que définies par les relations (9.110) et (9.111), ainsi que la valeur maximale après une révolution de la solution, sont données dans le Tableau 9.6 pour les trois schémas suivants : le schéma décentré d'ordre 1 (FOU), le schéma monopente (LG), et la nouvelle méthode multipente associée au limiteur CFL-Hybride (GM-CFL-Hyb). Les Figure 9.19, Figure 9.20 et Figure 9.21 représentent les niveaux de la solution finale dans les plans (XY), (XZ) et (YZ), obtenus respectivement avec les schémas LG et GM-CFL-Hyb. Ces résultats sont en accord avec les tendances observées sur les cas 2D précédents. La fonctionnalité et l'efficacité de la nouvelle méthode multipente sur un maillage 3D non structuré sont ainsi démontrées, de même que sa précision supérieure à celle d'une méthode monopente classique.

9.6.4 Cas-test de la marche dans un écoulement à Mach 3

La nouvelle méthode multipente est maintenant appliquée au système des équations d'Euler compressibles. Pour cela, nous considérons un cas-test classique, introduit d'abord par EMERY [86], puis utilisé ensuite à de nombreuses reprises, notamment par WOODWARD et COLELLA [302] et plus récemment par BUFFARD et CLAIN [29]. Un écoulement uniforme à Mach 3 pénètre par l'entrée gauche d'un canal 2D, long de trois mètres et large d'un mètre. Une marche de 0.2 m de hauteur est située à 0.6 m de l'entrée du canal (cf. Figure 9.23). Le canal est initialement

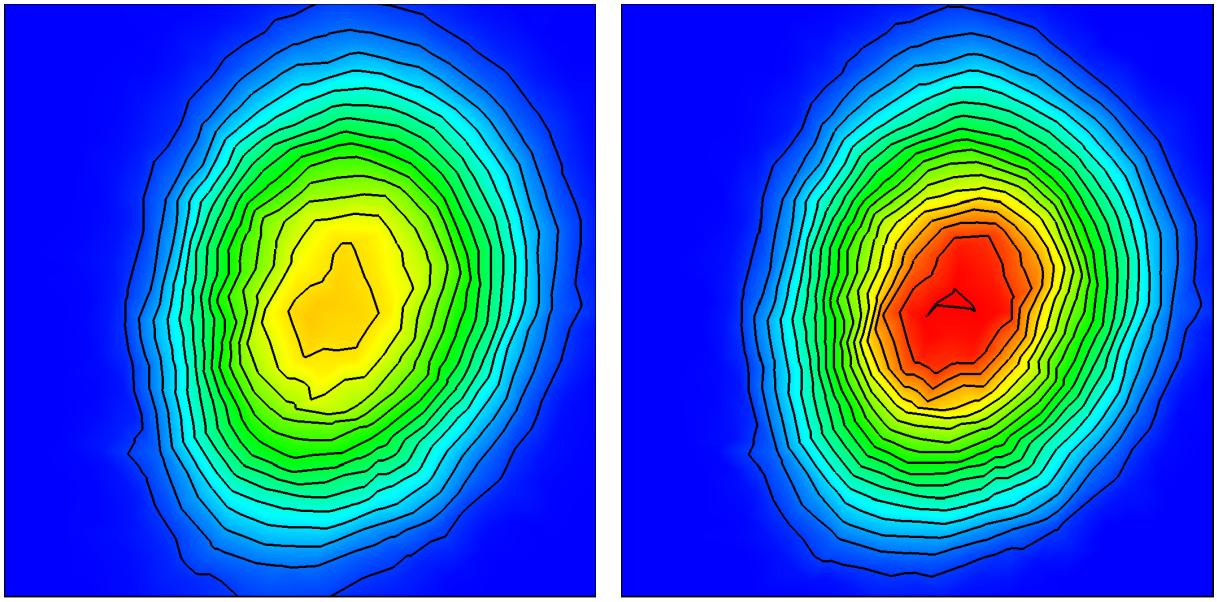


FIGURE 9.20 – ***Solution finale dans le plan*** (XZ) ***avec les schémas LG (gauche) et GM-CFL-Hyb (droite).***

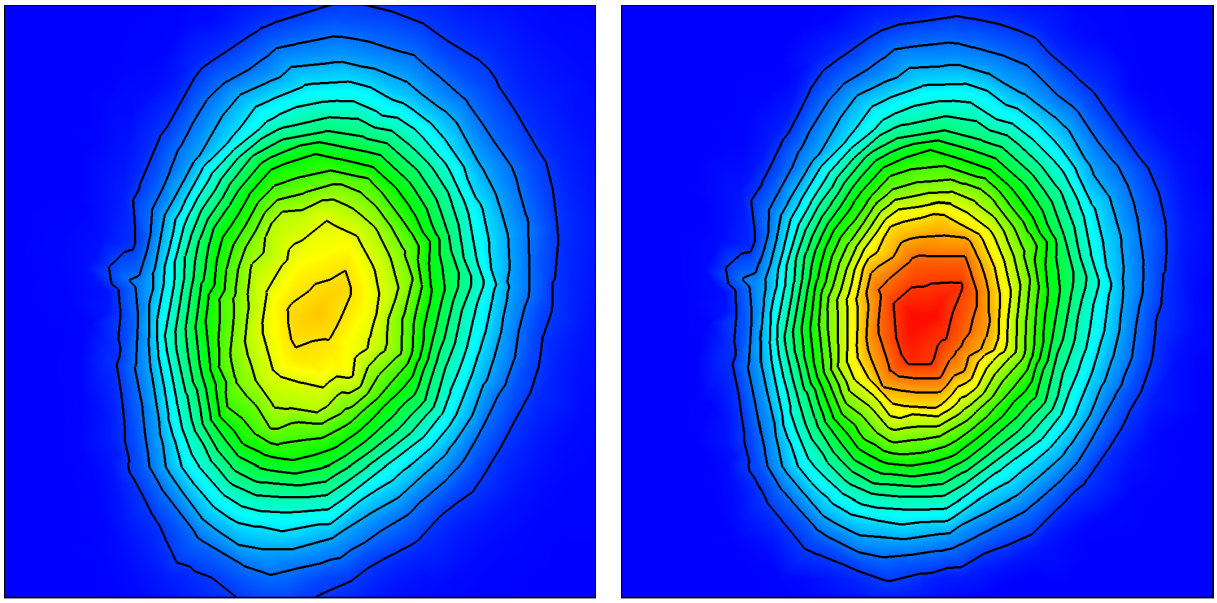


FIGURE 9.21 – ***Solution finale dans le plan*** (YZ) ***avec les schémas LG (gauche) et GM-CFL-Hyb (droite).***

rempli d'un gaz parfait sous les conditions suivantes : $P = 1, \rho = 1.4, \gamma = 1.4, v_x = 3$ (unités S.I.). Ainsi, la vitesse du son initiale vaut $c_0 = (\gamma P/\rho)^{1/2} = 1$. Le même gaz, sous les mêmes conditions, est injecté en continu depuis l'entrée gauche du canal.

La simulation est réalisée sur un maillage non structuré composé de plusieurs types d'éléments, dont on peut voir un échantillon sur la Figure 9.22. Précisément, il est composé de 16836 cellules triangulaires et quadrangulaires. Ce nombre est très proche de celui utilisé par WOODWARD et COLELLA [302] (16128) sur un maillage structuré, et par BUFFARD et CLAIN [29] (16714) sur un maillage uniquement composé de triangles. Le flux numérique utilisé est basé sur le solveur de Riemann approché HLL (HARTEN et al. [134]). Ainsi, aucun traitement particulier n'est nécessaire pour gérer la singularité au niveau de l'angle de la marche (BUFFARD et CLAIN [29]).

La reconstruction multipente est opérée sur les variables primitives $(P, \boldsymbol{v}, \rho)$. De plus, puisqu'on doit maintenant traiter un système d'équations et non plus une simple équation scalaire, il est nécessaire de clarifier la définition du pseudo-terme CFL ν_{ij}^{+} que nous avons introduit dans le limiteur CFL-Hybride. Au cours de la démonstration de stabilité, ce terme a été défini comme (voir la relation (9.54) en § 9.4.2)

$$\nu_{ij}^{+} = \Delta t \frac{|S_{ij}|}{|K_i|} \frac{\partial \phi_{ij}}{\partial U_1}\left(\widetilde{U_{ij}}, U_i\right) . \tag{9.123}$$

Or, l'extension de cette définition au cas vectoriel n'est pas immédiate. Nous choisissons de prendre l'onde de célérité maximale qui franchit la face courante, c'est-à-dire

$$\nu_{ij}^{+} = \Delta t \frac{|S_{ij}|}{|K_i|}\left(|\boldsymbol{v}_i \cdot \boldsymbol{n}_{ij}| + c_i\right), \tag{9.124}$$

avec $\boldsymbol{v}_i$ le vecteur vitesse au centre de la cellule, $\boldsymbol{n}_{ij}$ le vecteur unitaire normal à la face et dirigé vers l'extérieur du volume, et c_i la vitesse du son au centre de la cellule.

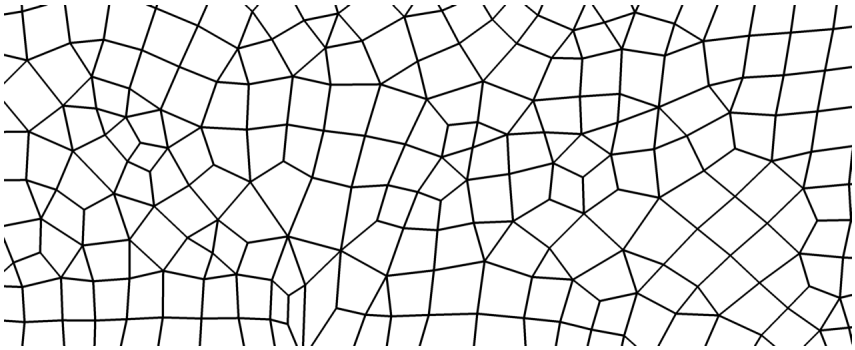


FIGURE 9.22 – ***Échantillon du maillage non structuré utilisé pour le cas-test du canal à Mach 3 avec une marche.***

Les résultats obtenus pour ce cas-test en utilisant le schéma décentré d'ordre 1 (FOU), la méthode monopente "à gradient limité" (LG), et la nouvelle méthode multipente associée au limiteur CFL-Hybride (GM-CFL-Hyb), sont respectivement représentés sur les Figure 9.23, Figure 9.24 et Figure 9.25. La Figure 9.26 représente les résultats obtenus avec le schéma GM-CFL-Hyb sur un maillage beaucoup plus fin, constitué d'environ 10^5 éléments. Ces résultats peuvent donc être considérés comme une référence lorsque l'on compare le comportement des différents schémas sur le maillage grossier. Toutes les figures incluent trente niveaux de densité, régulièrement espacés entre 0.25 et 6, et représentés au temps $t = 4$, comme dans les références WOODWARD et COLELLA [302] et BUFFARD et CLAIN [29]. Ces résultats ont été obtenus avec un schéma d'intégration en temps Runge-Kutta explicite d'ordre 2, et le pas de temps a été fixé à $\Delta t \approx 5 \cdot 10^{-4}$ pour les calculs sur le maillage grossier, et $\Delta t \approx 2.5 \cdot 10^{-4}$ sur le maillage fin. De plus, si

$$h_i = 4\,|K_i| \Big/ \sum_{j \in \mathcal{V}(i)} |S_{ij}| \tag{9.125}$$

désigne la taille d'un élément K_i, alors $h_0 = \min_{K_i} h_i$ représente la taille d'élément minimale sur tout le domaine de calcul. Nous avons ainsi $h_0 \approx 5 \cdot 10^{-3}$ pour le maillage grossier et $h_0 \approx 2.5 \cdot 10^{-3}$ pour le maillage fin. A l'instant initial, la valeur maximale du critère CFL pour les deux maillages est donc de

$$\nu_{max} = M \frac{\Delta t}{h_0} \approx 0.4\,, \quad \text{avec} \quad M = \max_{\substack{K_i \\ t=0}} (\|\boldsymbol{v}_i\| + c_i) = 4\,. \tag{9.126}$$

La comparaison des Figure 9.23, Figure 9.24 et Figure 9.25 montre tout d'abord qu'une précision supérieure est apportée par les schémas d'ordre 2. Le schéma GM-CFL-Hyb offre également une meilleure résolution des isolignes de densité par rapport au schéma monopente. On remarque aussi que ces isolignes sont légèrement mieux résolues que celles obtenues par BUFFARD et CLAIN [29] sur un maillage composé uniquement d'éléments triangulaires. De plus, nous reconstruisons les variables au barycentre $\boldsymbol{M}_{ij}$ des faces, alors que dans la référence BUFFARD et CLAIN [29] il est indiqué que les calculs peuvent échouer lorsque ce point est utilisé.

9.6.5 Cas-test de jet liquide

Nous considérons maintenant un cas plus exigeant en terme de robustesse, car impliquant un écoulement diphasique. Un jet d'eau liquide est injecté à une vitesse de 20 m/s, avec une pression de 1 bar et une température de 300 K, dans de l'air au repos aux mêmes pression et température. Ce cas est modélisé par les équations de Navier-Stokes compressibles multi-espèces (cf. Chapitre 5). L'eau liquide et l'air sont donc les deux espèces d'un fluide unique, qui est localement décrit par une seule pression, vitesse et température. Il n'y a ni reconstruction locale de l'interface liquide-gaz, ni modélisation de la turbulence. L'objectif ici est simplement d'évaluer la robustesse et la stabilité de la méthode malgré le haut rapport de densité.

Nous utilisons un maillage non structuré, constitué d'environ 138000 éléments polygonaux quelconques (cf. Figure 9.27). Les flux numériques sont basés sur un solveur de Riemann approché HLLC (cf. § 8.2.1), et un schéma

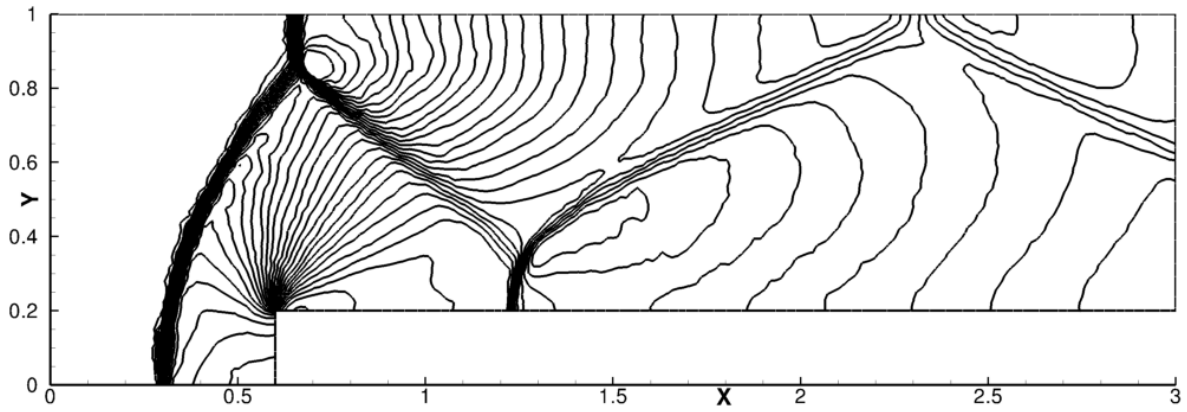


FIGURE 9.23 – *Schéma FOU, maillage grossier.*

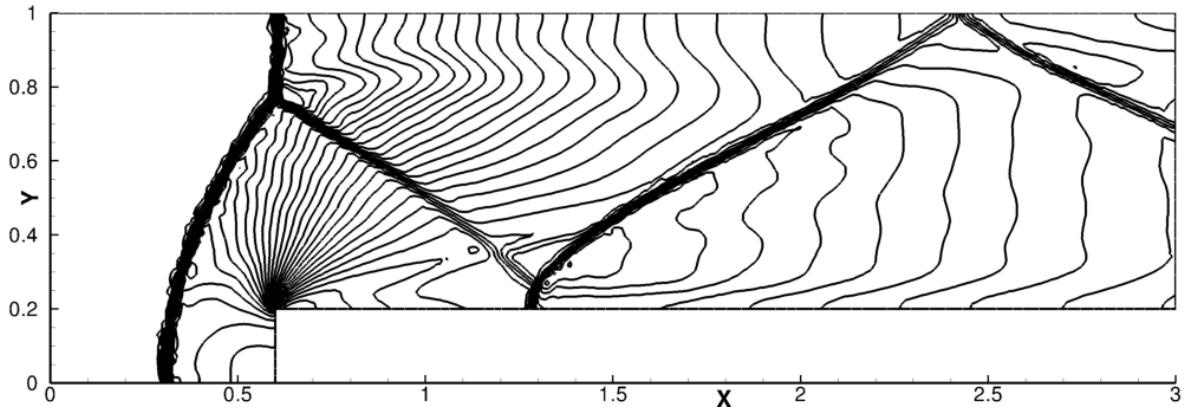


FIGURE 9.24 – *Schéma LG, maillage grossier.*

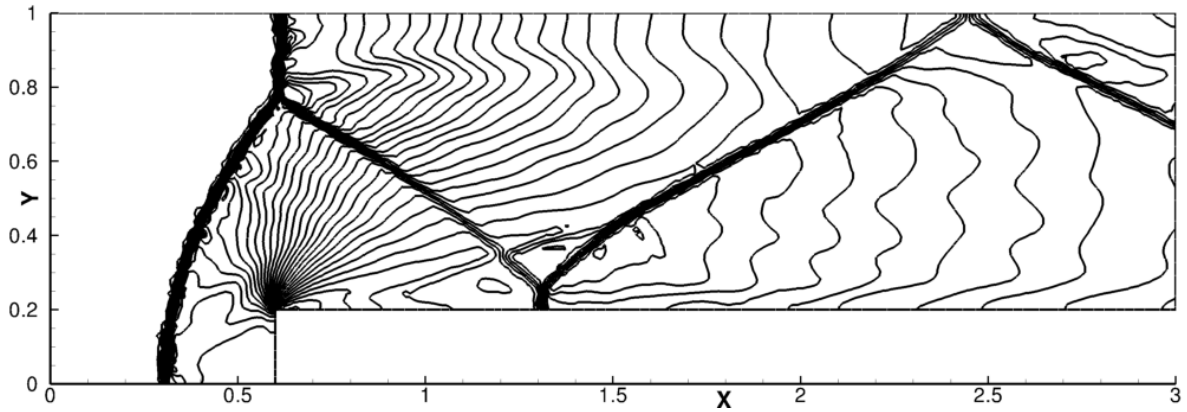


FIGURE 9.25 – *Schéma GM-CFL-Hyb, maillage grossier.*

explicite d'ordre 2 en temps est utilisé. Le pas de temps est fixé à $\Delta t = 10^{-5}$ s, ce qui implique le nombre CFL maximum suivant :

$$\nu_{max} \approx \Delta t \max_{K_i}\left(\frac{|S_{ij}|}{|K_i|}\right)\left(\max_{K_i}\|\boldsymbol{v}_i\| + \max_{K_i} c_i\right) \approx 0.3\,, \tag{9.127}$$

avec un diamètre de cellule minimum de 0.05 m, et une vitesse du son maximale de 1415 m/s dans l'eau pure. Les niveaux de densité du mélange liquide-gaz obtenus avec le schéma décentré d'ordre 1 (FOU), et la méthode multipente associée au limiteur CFL-Hybride (GM-CFL-Hyb), sont représentés sur la Figure 9.28 au temps t = 1.95 s. La Figure 9.29 représente les niveaux de fraction massique de liquide obtenus avec ces deux schémas au même instant. La comparaison entre les schémas FOU et GM-CFL-Hyb révèle très clairement le gain de précision apporté par la méthode multipente en comparaison de la méthode d'ordre 1. En particulier, l'interface liquide-gaz est à peine visible dans le calcul à l'ordre 1, alors que le schéma multipente fournit une définition beaucoup plus mince de l'interface.

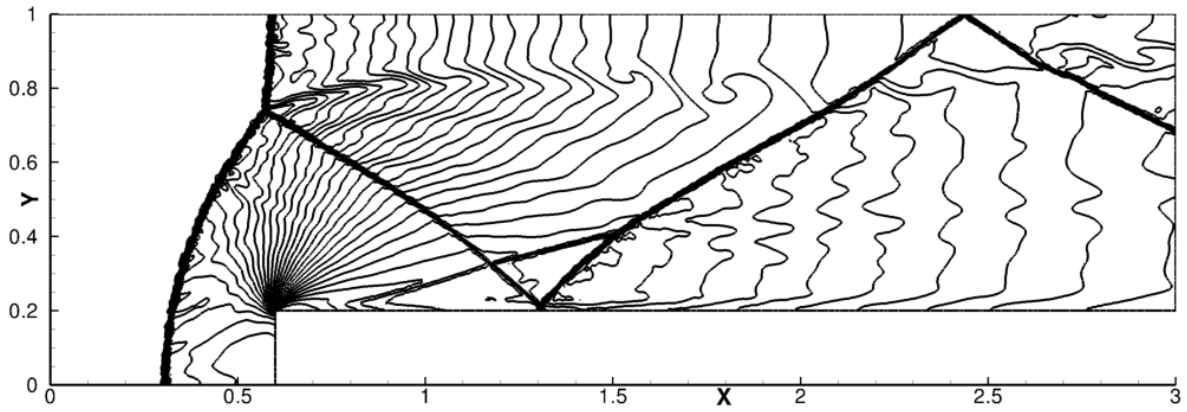


FIGURE 9.26 – ***Schéma GM-CFL-Hyb, maillage fin.***

Par ailleurs, la méthode monopente classique que nous avions utilisée dans les cas-tests précédents a aussi été testée sur ce cas. Cependant le calcul échoue, même en utilisant un pas de temps abaissé jusqu'à $\Delta t = 2.\ 10^{-6}$ s, ce qui correspond à un nombre CFL d'environ 0.06. De fortes oscillations de pression surviennent au cours du calcul, jusqu'à ce que celui-ci soit stoppé en raison d'une pression négative. La raison du manque de robustesse de la méthode monopente directionnelle sur ce cas n'est pas clairement identifiée. Par ailleurs, nous n'avons pas testé toutes les méthodes monopentes, et donc il ne s'agit pas ici de conclure de manière générale sur la comparaison des méthodes multipentes et monopentes. Il est possible qu'une méthode monopente non directionnelle ne souffre pas des mêmes problèmes de robustesse, malheureusement elles sont très fortement dissipatives comme nous l'avons souligné au Chapitre 8. Quoi qu'il en soit, l'utilisation de la nouvelle méthode multipente sur ce cas n'a révélé aucun problème de stabilité, tout en étant manifestement capable de résoudre un certain nombre de structures de l'écoulement.

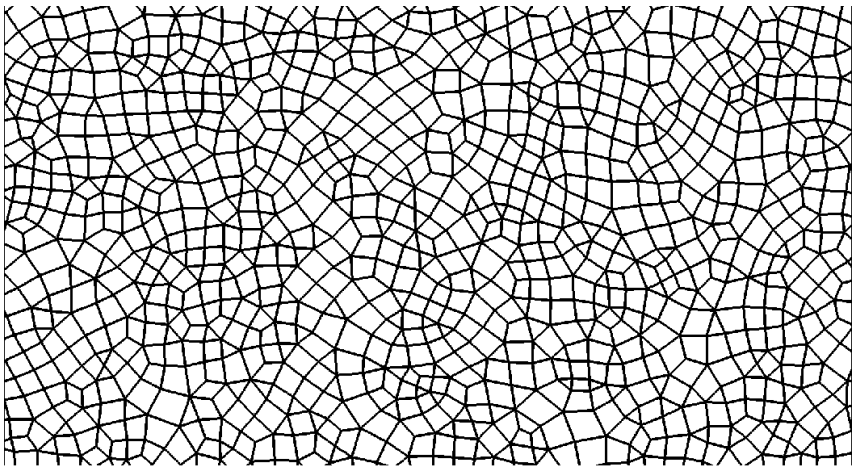


FIGURE 9.27 – ***Échantillon du maillage non structuré utilisé pour le cas-test du jet liquide.***

9.7 Conclusions et perspectives de développement

Nous avons introduit dans ce chapitre une nouvelle méthode MUSCL multipente pour les discrétisations en volumes finis "cell-center" sur maillages non structurés généraux. Par rapport aux méthodes développées précédemment dans la littérature, la nouvelle méthode multipente est capable de traiter des maillages non structurés complètement généraux, constitués d'éléments polyédriques quelconques (tétraèdres, hexaèdres, prismes...). Elle n'est pas limitée aux maillages constitués uniquement de tétraèdres, ou uniquement structurés, mais peut facilement gérer les maillages hybrides. Une précision d'ordre 2 optimale est atteinte grâce à la reconstruction des variables aux barycentres des faces. De plus, il a été démontré que la méthode respecte le principe du maximum pour une équation de conservation scalaire.

Des cas-tests numériques basiques ont démontré l'apport de la méthode multipente par rapport à une méthode monopente classique. En effet, une précision supérieure est atteinte dans la plupart des cas. Ce comportement

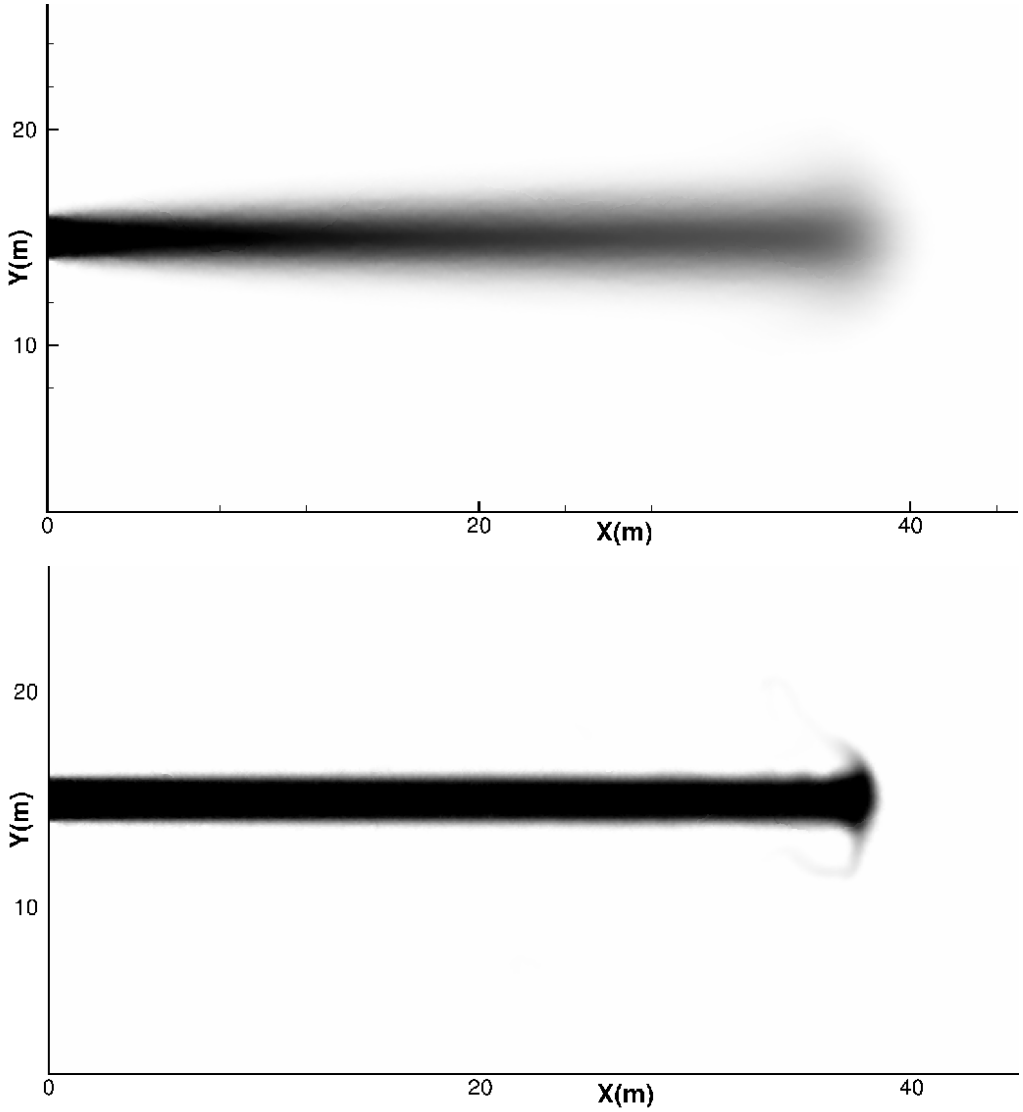


FIGURE 9.28 – ***Niveaux de densité pour le mélange liquide-gaz avec le schéma FOU (en haut) et le schéma GM-CFL-Hyb (en bas). Valeur min :*** $\rho_{min} = 1.17$. ***Valeur max :*** $\rho_{max} = 999.8$.

est renforcé lorsque la topologie des maillages implique une forte courbure ou des éléments polyédriques. Par ailleurs, la méthode multipente se révèle plus robuste qu'une méthode monopente classique. Aussi, associée à des flux numériques décentrés, la méthode multipente semble constituer une bonne garantie de robustesse pour des applications complexes et exigeantes, impliquant de forts rapports de densité, des discontinuités ou des chocs. La méthode multipente a été implémentée dans le code CEDRE de l'ONERA, plus précisément dans les solveurs eulériens CHARME et SPIREE (cf. Partie II). Elle a été appliquée avec succès à diverses applications en propulsion spatiale, impliquant des écoulements diphasiques réactifs et turbulents (LE TOUZE et al. [170, 171], Chapitre 11), pour lesquels les approches monopentes directionnelles classiques peuvent souffrir de problèmes de robustesse.

Nous concluons ce chapitre en présentant ci-dessous une liste non exhaustive de pistes d'amélioration et de développement de la méthode multipente.

– Un certain nombre de points en relation avec la ***forme des limiteurs de pente*** mériteraient d'être étudiés plus en détail. C'est le cas notamment de l'influence de la valeur des coefficients introduits dans la fonction switch (9.98). Il serait également intéressant de tester l'apport d'un coefficient $k > 1$ dans la définition de la borne supérieure des limiteurs (cf. relation (9.93)), et évaluer ainsi précisément le meilleur compromis entre précision et stabilité. De manière plus générale, il parait aussi envisageable d'établir des conditions suffisantes de stabilité moins restrictives à partir de la relation (9.82), peut-être plus spécifiques à chaque cas. Enfin, comme nous l'avons souligné en § 9.5, la propriété de symétrie des limiteurs parait incompatible avec l'irrégularité du stencil de reconstruction en maillages non structurés. Aussi, on peut se demander quel serait le comportement de la méthode multipente si l'on avait inversé la définition du rapport de pentes r_{ij}, et que

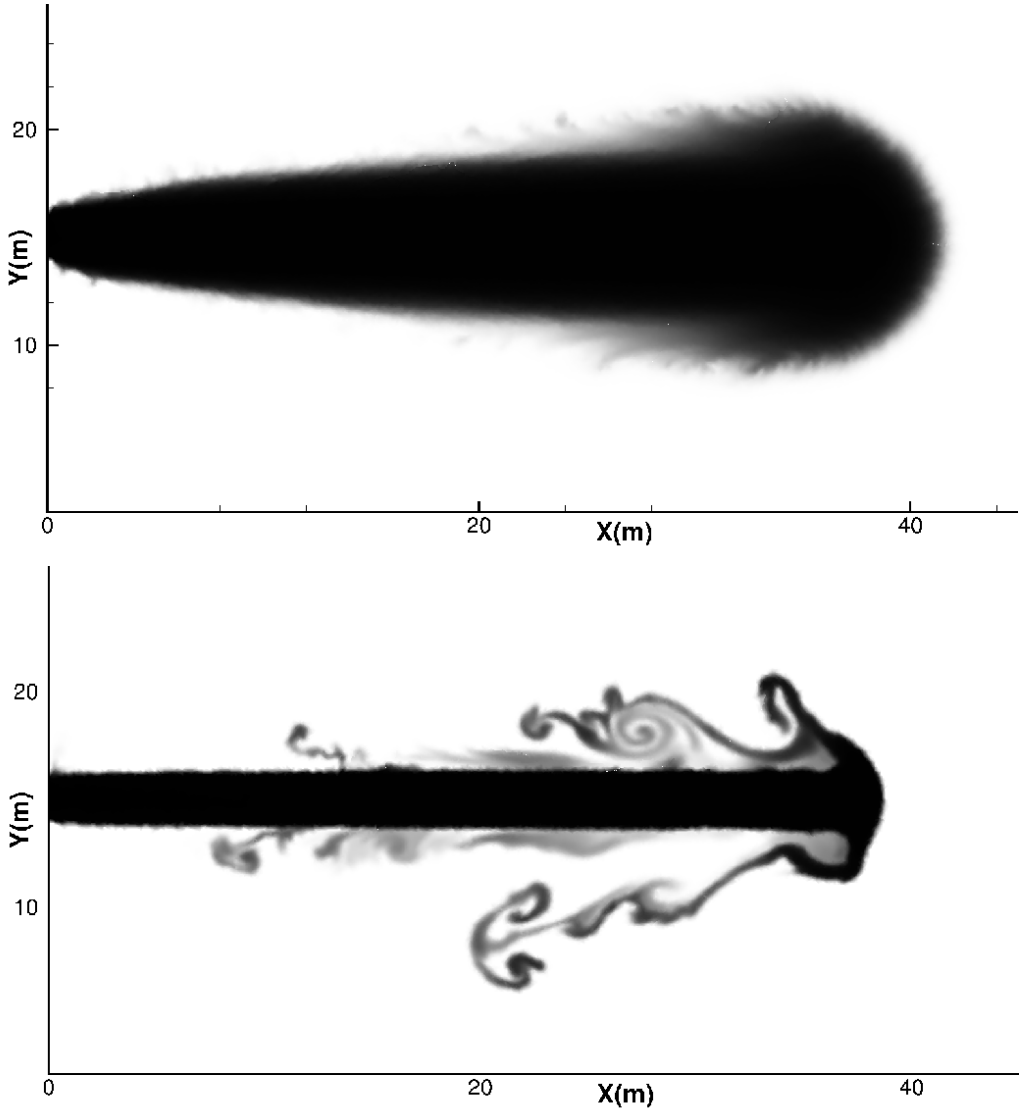


FIGURE 9.29 – ***Niveaux de fraction massique de liquide avec le schéma FOU (en haut) et le schéma GM-CFL-Hyb (en bas).***

l'on avait utilisé la pente amont plutôt que la pente aval dans les définitions (9.13) et (9.14).

- La ***définition du nombre CFL*** qui intervient dans les limiteurs n'est pas complètement claire dans le cas vectoriel, c'est-à-dire lorsque l'on traite des systèmes d'équations. Plusieurs choix paraissent possibles, ce qui justifierait une analyse détaillée. De même, la question se pose de l'influence précise de l'introduction du nombre CFL dans les limiteurs en cas d'intégration temporelle implicite, dans la mesure où les démonstrations ont été réalisées ici dans le cadre d'une intégration explicite.
- Toujours dans le cas vectoriel, la question du choix des variables interpolées n'est pas non plus complètement tranchée. Si de manière classique, on préfère souvent interpoler les variables primitives plutôt que les variables conservatives, il n'en reste pas moins quelques questions ouvertes. Notamment, l'utilisation de certains schémas de flux numériques peut avoir un impact sur la pertinence du choix d'un jeu de variables ou sur d'éventuelles corrections à apporter dans le calcul des interpolations. On pense par exemple aux schémas cinétiques dédiés au système des gaz sans pression (BOUCHUT et al. [26]).
- Enfin, une dernière perspective à plus long terme concerne la montée en ordre de la méthode multipente. Pour monter en ordre, il faut tout d'abord opérer plusieurs reconstructions aux faces, puisqu'utiliser un seul point de quadrature pour l'évaluation des flux ne peut fournir au maximum qu'une précision d'ordre 2. Ensuite, il faut que les interpolations aux points de quadrature soient d'ordre supérieur à 2, c'est-à-dire calculées à partir de reconstructions polynomiales de degré strictement supérieur à 1. On n'aurait donc plus à gérer une pente amont et une pente aval, mais éventuellement des polynômes de degrés quelconques. Il se pose alors deux questions essentielles :
  1. que deviennent les conditions de stabilité dans le cas scalaire (équation d'advection) ? Et dans le cas

vectoriel (équations d'Euler, gaz sans pression) ? Et par conséquent, quelle procédure de limitation faut-il adopter pour garantir la stabilité des schémas numériques ?

2. d'un point de vue pratique, l'évaluation de polynômes de degré supérieur à 1 implique une extension du stencil de reconstruction (la connaissance d'un voisinage plus lointain est nécessaire). Quel impact cela a-t-il sur la parallélisation efficace d'un code de calcul tel que CEDRE (échanges MPI) ?

D'importants développements ont été menés dans le code CEDRE ces dernières années afin de permettre la montée à l'ordre élevé des schémas numériques (HAIDER [126–131]). Les méthodes mises en œuvre constituent une généralisation de l'approche MUSCL pour des reconstructions polynomiales de degré quelconque. Si les problèmes soulevés par le point 1 ci-dessus ne sont pas complètement tranchés aujourd'hui (les schémas d'ordre élevé peuvent encore souffrir de problèmes de robustesse sur des cas exigeants, par exemple avec forts rapports de densité), le point 2 a été spécifiquement pris en compte dès le départ. Les échanges entre domaines sont ainsi limités au premier voisinage des cellules quel que soit le degré de la reconstruction polynomiale. Pour cela, le calcul des polynômes est effectué de manière itérative en échangeant successivement des dérivées d'ordre croissant. La montée en ordre de la méthode multipente pourrait donc s'inspirer de cette approche.

Une autre voie qu'il serait intéressant d'explorer est celle des méthodes MOOD (Multi-dimensional Optimal Order Detection), développées récemment par CLAIN et al. [44] et DIOT et al. [65–68]. Le principe de ces méthodes est assez différent de l'approche MUSCL habituelle. En effet, la limitation n'est pas effectuée ***a priori*** mais ***a posteriori***, selon un processus itératif de décrémentation progressive du degré des reconstructions polynomiales locales, jusqu'à satisfaire certains critères de stabilité. Ainsi, des reconstructions polynomiales de degrés quelconques sont d'abord opérées, elles permettent d'effectuer des interpolations non limitées aux différents points de quadrature des faces. Les variables du système sont ensuite avancées en temps selon une intégration explicite, éventuellement à plusieurs pas. La valeur obtenue est alors évaluée au regard d'un ou plusieurs critères de stabilité spécifiques au problème traité (respect d'un principe du maximum ou positivité de la variable par exemple). Dans le cas où le test a échoué (par exemple en cas de violation du principe du maximum provoquée par la présence d'une discontinuité), alors le processus est répété en décrémentant le degré des reconstructions polynomiales, jusqu'à éventuellement retomber à l'ordre 1. Dans cette approche, il n'y a donc jamais de procédure de limitation à proprement parler. Aussi, il pourrait être intéressant d'intégrer la reconstruction multipente à la stratégie MOOD, comme une étape intermédiaire entre la reconstruction polynomiale de degré 1 non limitée, et la dégéneresence à l'ordre 1.

Chapitre 10

Modélisation du couplage CHARME-SPIREE pour l'atomisation primaire

*Nous avons établi dans la Partie II les bases de notre stratégie pour décrire l'atomisation primaire du jet d'oxygène liquide. Celle-ci repose sur des termes sources de couplage entre les solveurs CHARME et SPIREE du code CEDRE, respectivement utilisés pour décrire l'écoulement diphasique à **phases séparées** et à **phase dispersée**. Dans ce contexte, l'atomisation primaire est représentée par un transfert du liquide de CHARME vers SPIREE. Nous allons voir dans ce chapitre qu'un transfert liquide-liquide en sens inverse est également mis en œuvre. Ce transfert avait été évoqué dans la Partie II et introduit sous l'appellation de **pseudo-coalescence**. Ce chapitre vise donc à présenter la modélisation développée pour l'ensemble des termes de transfert liquide-liquide entre CHARME et SPIREE, à analyser leur impact en terme de variation de pression induite dans le solveur CHARME, et enfin à effectuer une première mise en œuvre de la stratégie sur une configuration simplifiée. A noter enfin que les premiers développements de ce modèle ont été présentés dans* Le Touze *et al. [171] et* Murrone *et al. [199].*

Sommaire

10.1 Présentation du modèle 193
10.2 Modélisation du transfert par atomisation primaire 194
10.2.1 Fréquence caractéristique de l'atomisation 194
10.2.2 Fonction d'efficacité 195
10.2.3 Propriétés des gouttes atomisées 196
10.2.4 Déduction des termes sources correspondants dans SPIREE 198
10.2.5 Lien entre le volume des cellules du maillage et le diamètre des gouttes atomisées 199
10.2.6 Remarque sur la conservation de la quantité de mouvement 200
10.3 Modélisation du transfert par pseudo-coalescence 201
10.3.1 Fréquence caractéristique 202
10.3.2 Forme de la fonction d'efficacité 203
10.3.3 Déduction des autres termes sources liés à la pseudo-coalescence 204
10.4 Analyse de la variation de pression générée par le transfert CHARME-SPIREE 204
10.5 Validation élémentaire du modèle sur une configuration simplifiée 213

10.1 Présentation du modèle

Le premier objectif de ce chapitre est de formuler l'expression de tous les termes sources liés aux transferts liquide-liquide entre CHARME et SPIREE. Il s'agit donc des transferts de masse entre l'espèce oxygène liquide du fluide et la phase dispersée, ainsi que des transferts associés de quantité de mouvement, d'énergie et éventuellement de densité en nombre de gouttes. Si l'on reprend les notations du Chapitre 6, sont donc concernés les termes $\mathcal{P}_N^{(k)}$, $\mathcal{P}_M^{(k)}$, $\mathcal{P}_V^{(k)}$ et $\mathcal{P}_E^{(k)}$ (vecteur terme source $\boldsymbol{S}_{\mathcal{P}}^{(k)}$) pour la phase dispersée, et les termes S_M^l, $\boldsymbol{S}_U$ et S_E pour le fluide.

Comme nous l'avons déjà évoqué, nous souhaitons pouvoir décrire un transfert liquide-liquide dans les deux sens, le transfert de CHARME vers SPIREE représentant uniquement le phénomène d'atomisation primaire, tandis que le transfert de SPIREE vers CHARME décrit plusieurs phénomènes différents, regroupés sous l'appellation de pseudo-coalescence, et dont la signification physique sera précisée au paragraphe § 10.3. Pour commencer, chacun des termes sources cités précédemment est décomposé en deux contributions, respectivement indicées "A" et "C" pour "Atomisation primaire" et "pseudo-Coalescence". Ainsi le terme source S_M^l se décompose en

$$\boxed{S_M^l = S_{M_C}^l - S_{M_A}^l\,,} \tag{10.1}$$

où $S_{M_A}^l$ est le terme qui décrit le transfert lié à l'atomisation primaire, donc uniquement de CHARME vers SPIREE, alors que $S_{M_C}^l$ décrit le transfert inverse par pseudo-coalescence, c'est-à-dire uniquement de SPIREE vers CHARME. De manière équivalente, on décompose dans SPIREE le terme $\mathcal{P}_M^{(k)}$ en deux contributions selon

$$\boxed{\mathcal{P}_M^{(k)} = \mathcal{P}_{M_A}^{(k)} - \mathcal{P}_{M_C}^{(k)}\,,} \tag{10.2}$$

puis on procède de même pour les termes qui concernent la quantité de mouvement, l'énergie et la densité en nombre de gouttes :

$$\boxed{\left\{\begin{array}{rcl} \mathcal{P}_V^{(k)} & = & \mathcal{P}_{V_A}^{(k)} - \mathcal{P}_{V_C}^{(k)} \\ \mathcal{P}_E^{(k)} & = & \mathcal{P}_{E_A}^{(k)} - \mathcal{P}_{E_C}^{(k)} \\ \mathcal{P}_N^{(k)} & = & \mathcal{P}_{N_A}^{(k)} - \mathcal{P}_{N_C}^{(k)} \end{array}\right.\,.} \tag{10.3}$$

De plus, nous avons toujours (cf. relation (6.9) au Chapitre 6)

$$\boxed{S_M^l = -\sum_{k=1}^{N_s} \mathcal{P}_M^{(k)}\,,} \tag{10.4}$$

qui se décompose ici en

$$\boxed{\left\{\begin{array}{rcl} S_{M_A}^l & = & \displaystyle\sum_{k=1}^{N_s} \mathcal{P}_{M_A}^{(k)} \\ S_{M_C}^l & = & \displaystyle\sum_{k=1}^{N_s} \mathcal{P}_{M_C}^{(k)} \end{array}\right.\,.} \tag{10.5}$$

Parmi l'ensemble de ces termes liés au transfert liquide-liquide, certains vont faire l'objet d'une modélisation tandis que les autres en découlent simplement. En l'occurrence, dans le cas des transferts par atomisation primaire, nous allons ***modéliser*** $S_{M_A}^l$, ce qui va permettre d'***en déduire*** $\mathcal{P}_{M_A}^{(k)}$, puis $\mathcal{P}_{V_A}^{(k)}$, $\mathcal{P}_{E_A}^{(k)}$ et $\mathcal{P}_{N_A}^{(k)}$ après avoir proposé une modélisation des distributions ou des valeurs moyennes du diamètre, de la vitesse, et de la température des gouttes créées (cf. § 10.2.3). Concernant les transferts par pseudo-coalescence, les termes $\mathcal{P}_{M_C}^{(k)}$ sont ceux qui doivent être ***modélisés***. Les termes $\mathcal{P}_{V_C}^{(k)}$, $\mathcal{P}_{E_C}^{(k)}$, et $\mathcal{P}_{N_C}^{(k)}$ seront ensuite ***déduits*** à partir des valeurs moyennes du diamètre, de la vitesse et de la température des gouttes, tandis que le terme $S_{M_C}^l$ sera déduit par sommation sur les sections des termes $\mathcal{P}_{M_C}^{(k)}$. Enfin, les contributions aux termes sources $\boldsymbol{S}_U$ et S_E du fluide sont obtenues en sommant les termes $\mathcal{P}_V^{(k)}$ et $\mathcal{P}_E^{(k)}$ sur toutes les sections, comme exprimé par la relation (6.9) du Chapitre 6.

10.2 Modélisation du transfert par atomisation primaire

Nous commençons par modéliser le terme de transfert de masse par atomisation primaire $S^l_{M_A}$. Ce terme s'exprime en kg/m^3/s et représente donc, une fois intégré en volume et en temps, la masse d'oxygène liquide transférée du solveur CHARME vers le solveur SPIREE. La formulation proposée est la suivante :

$$\boxed{S^l_{M_A} = \rho Y_l \, f_A \, \lambda_A\big(Y_l\big)\,,} \tag{10.6}$$

avec Y_l désignant la fraction massique de l'oxygène liquide (espèce $i = N_t$ du fluide CHARME selon les notations du Chapitre 5). Dans chaque volume de contrôle, le débit d'atomisation est donc proportionnel à ρY_l, la masse d'oxygène liquide par unité de volume, ainsi qu'à

- une ***fréquence caractéristique*** du processus d'atomisation primaire, notée f_A,
- et une ***fonction d'efficacité*** λ_A, que l'on suppose uniquement dépendante de Y_l, la fraction massique locale d'oxygène liquide.

10.2.1 Fréquence caractéristique de l'atomisation

Comme nous l'avons vu au Chapitre 2, la configuration Mascotte qui nous intéresse implique un régime d'atomisation primaire aérodynamique, avec des nombres de Weber et de Reynolds très élevés. Nous faisons donc le choix de relier la fréquence caractéristique du processus d'atomisation ***à l'intensité du gradient de vitesse local du fluide CHARME***, à défaut de disposer d'une information sur le différentiel de vitesse local entre phases [1]. L'intensité du gradient de vitesse peut être évaluée sous différentes formes, ayant toutes la dimension d'une fréquence temporelle, parmi lesquelles :

- $\sqrt{|Q|}$, ***la racine carrée de la valeur absolue du critère Q***. Ce critère, introduit par HUNT et al. [143], est défini comme le second invariant du tenseur gradient de vitesse. Il s'exprime donc en s^{-2} et peut être positif ou négatif. Si l'on note $\boldsymbol{L} = \nabla \otimes \boldsymbol{u}$, le tenseur gradient de vitesse, alors le critère Q est défini en écoulement compressible [2] comme :

$$Q = L_{11}L_{22} + L_{11}L_{33} + L_{22}L_{33} \; - \; \Big(L_{12}L_{21} + L_{13}L_{31} + L_{23}L_{32}\Big)\,. \tag{10.7}$$

- $\|\omega\|$, ***la norme du vecteur vorticité***. Le vecteur vorticité caractérise également les zones tourbillonaires. Il est défini comme le rotationnel du gradient de vitesse, qui s'exprime en coordonnées cartésiennes :

$$\boldsymbol{\omega} = \nabla \wedge \boldsymbol{u} = \begin{pmatrix} \partial_y u_z - \partial_z u_y \\ \partial_z u_x - \partial_x u_z \\ \partial_x u_y - \partial_y u_x \end{pmatrix}. \tag{10.8}$$

- f_T, ***la fréquence turbulente***. Dans le cadre de la LES des écoulements compressibles, celle-ci est estimée à partir du second invariant du déviateur du tenseur des déformations symétrique, noté II_D (voir les définitions de l'Annexe C) :

$$f_T \; = \; \sqrt{2II_D}\,. \tag{10.9}$$

  Il s'agit de la même fréquence que celle utilisée dans CHARME pour piloter les taux de réaction chimiques dans le modèle MRE (cf. § 7.3), à une constante près placée devant le terme $\sqrt{2II_D}$.

Dès la mise en place du modèle, la troisième option est celle que nous avons retenue, et nous avons donc finalement

$$\boxed{f_A = f_T \; = \; \sqrt{2II_D}\,.} \tag{10.10}$$

Pour autant, rien ne justifie que ce choix soit plus ou moins pertinent que celui du critère Q ou de la vorticité. Quoi qu'il en soit, aucune comparaison n'a été menée au cours de cette étude, et nous nous en tenons donc pour l'instant à ce choix. Il n'est pas impossible, cependant, que l'utilisation du critère Q permette une plus grande finesse de la modélisation, notamment en permettant de traiter différemment les zones de cisaillement et les zones de vorticité.

1. On rappelle que dans le cadre du modèle à 4 équations sur lequel est basé le solveur CHARME, le fluide est supposé être localement homogène, et par conséquent n'est décrit que par une seule vitesse moyenne.

2. En écoulement incompressible, la trace du tenseur gradient de vitesse est nulle et le critère Q représente alors l'équilibre entre le tenseur rotationnel antisymétrique $\boldsymbol{\Omega}$ et le tenseur des déformations symétrique $\boldsymbol{S}$ (cf. Annexe C) : $Q = (\Omega_{ij}\Omega_{ij} - S_{ij}S_{ij})/2$. Selon son signe et son intensité, il renseigne donc sur la position des zones de vorticité ou de cisaillement (DUBIEF et DELCAYRE [76], von TERZI et al. [295]).

10.2.2 Fonction d'efficacité

Le rôle de la fonction d'efficacité est essentiel. Elle doit faire en sorte que le transfert soit réalisé dans des volumes de contrôle où ***le volume occupé par la phase liquide de CHARME est négligeable***, et ce pour deux raisons :

(i) être cohérent avec l'hypothèse sous-jacente aux solveurs CHARME et SPIREE. La fraction volumique dans SPIREE doit ainsi être suffisament faible pour pouvoir être négligée dans CHARME, puisque celui-ci n'en tient pas compte dans la partie convective de ses équations.

(ii) éviter que le transfert s'accompagne d'une variation de pression (non physique) trop importante dans CHARME. En effet, si notre stratégie de couplage est totalement conservative en masse, quantité de mouvement et énergie, elle ne l'est inévitablement pas en volume du point de vue du solveur CHARME. Puisque celui-ci ne tient pas compte du volume occupé par la phase dispersée dans SPIREE, tout transfert de masse de CHARME vers SPIREE (et inversement) ***ne s'accompagne pas d'une variation de volume dans CHARME***. Il en résulte inévitablement une variation de la densité moyenne du fluide, et par conséquent une variation de pression. C'est pourquoi il est primordial que le transfert soit réalisé dans des volumes de contrôle où la fraction volumique de la phase gazeuse est significative. En effet, celle-ci étant beaucoup plus compressible que la phase liquide, ses variations de densité impliquent des variations de pression beaucoup plus faibles [3]. Ce point essentiel sera analysé et quantifié précisément au paragraphe § 10.4.

L'idée essentielle ici consiste donc à profiter du fait que l'interface soit diffuse pour réaliser le transfert ***"au bord" de la zone de diffusion numérique*** (cf. Figure 10.5). Nous proposons ainsi l'expression suivante de la fonction d'efficacité :

$$\boxed{\lambda_A\left(Y_l\right) = 1 - \tanh\left(a_\lambda Y_l^{b_\lambda}\right)\ .} \tag{10.11}$$

Les constantes a_λ et b_λ apparaissant dans l'équation (10.11) ont été prises égales à :

$$\boxed{a_\lambda = 4\,, \quad b_\lambda = 2\,,} \tag{10.12}$$

si bien que la fonction d'efficacité prend la forme représentée sur la Figure 10.1. La valeur de ces constantes a été fixée à partir de tests effectués sur une configuration simplifiée représentative du banc Mascotte, que l'on ne reproduit pas ici. Aucune étude paramétrique n'a pu être menée quant à l'influence de ces constantes sur le modèle, ce qui constitue une piste de travail ultérieure. Par conséquent, il est évidemment difficile de savoir si ces valeurs ont une quelconque portée générale. L'application possible du modèle à d'autres configurations constituera donc également une piste de réflexion pour de futurs travaux.

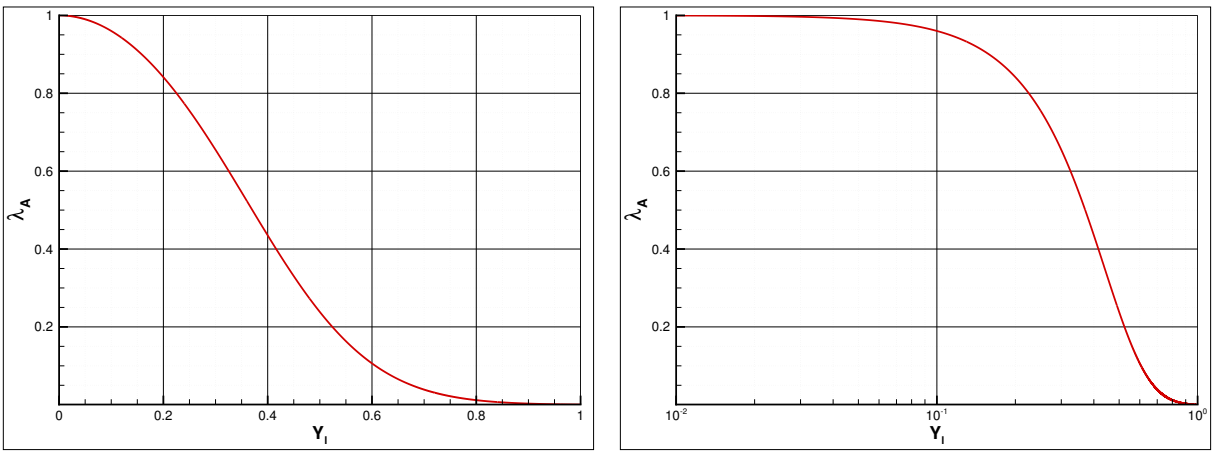


FIGURE 10.1 – ***Forme de la fonction d'efficacité λ_A en fonction de la fraction massique de l'espèce liquide dans CHARME. Échelle linéaire (gauche) et logarithmique (droite).***

3. Il est d'ailleurs à noter qu'il se produit exactement le même phénomène dans le cas classique du couplage par évaporation / condensation entre une phase gazeuse traitée par CHARME et une phase dispersée traitée par SPIREE. Simplement, puisque cela n'implique pas la présence d'une phase liquide dans CHARME, la variation de pression observée au moment du transfert est toujours parfaitement négligeable, en raison de la compressibilité élevée de la phase gazeuse.

10.2.3 Propriétés des gouttes atomisées

Une fois le transfert opéré de CHARME vers SPIREE, la masse de liquide est supposée se retrouver sous forme de gouttes. Il reste donc à ***modéliser les distributions en taille, vitesse et température de ces gouttes nouvellement créées***. Dans l'idéal, le modèle le plus performant devrait être capable de prédire effectivement des distributions à l'échelle de chaque volume de contrôle, sur la base de considérations locales. Le modèle serait ainsi dynamique, s'adapterait aux propriétés locales de l'écoulement et constituerait donc un modèle d'atomisation primaire complet. Avant d'en arriver à ce niveau de description, il est possible d'envisager une démarche progressive, par exemple selon les étapes suivantes qui sont d'un niveau de complexité croissant (cf. Figure 10.2 et Figure 10.3) :

1. prédiction (ou supposition) de ***grandeurs moyennes uniques*** pour l'ensemble de la configuration étudiée. Cette approche est forcément spécifique à chaque cas, et ne peut s'appliquer raisonnablement que pour une simulation d'un point de fonctionnement en régime nominal. Il s'agit en effet de considérer les conditions nominales de fonctionnement en termes de nombres caractéristiques (nombres de Reynolds, nombres de Weber, rapport de quantité de mouvement), et d'en déduire des grandeurs moyennes (diamètre, vitesse, température) uniques pour l'ensemble de la configuration [4].
2. prédiction (ou supposition) de ***distributions uniques*** pour l'ensemble de la configuration étudiée. Il s'agit essentiellement de la même approche que précédemment, avec toutefois une amélioration apportée par l'utilisation de distributions plutôt que de simples grandeurs moyennes.
3. prédiction de ***grandeurs moyennes dynamiques***. Un diamètre, une vitesse et une température uniques par maille sont prédits, mais de manière dynamique, c'est-à-dire en fonction de l'évolution spatiale et temporelle des propriétés de l'écoulement.
4. prédiction de ***distributions dynamiques***, ce qui constitue donc a priori le plus haut niveau possible de modélisation.

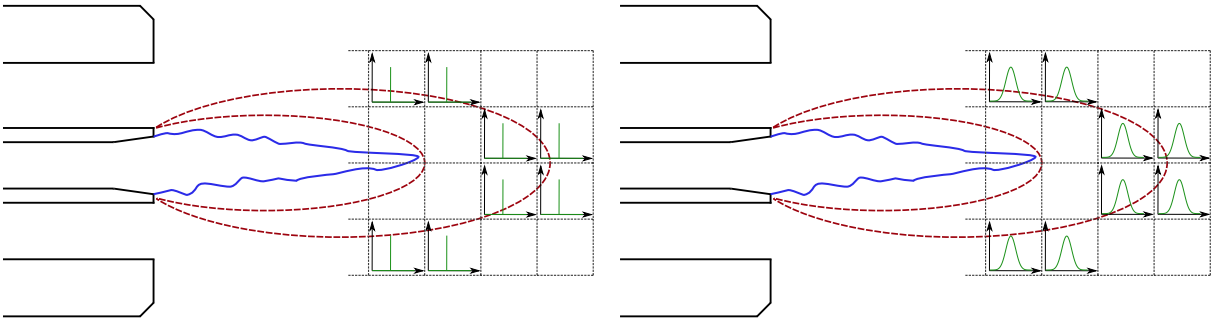


FIGURE 10.2 – ***Illustration des possibilités pour la modélisation des gouttes créées : grandeurs moyennes ou distributions uniques (bas niveau de précision).***

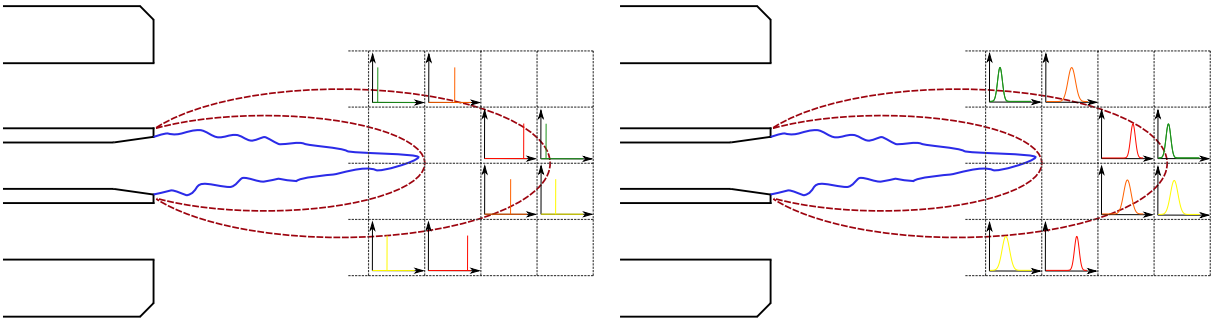


FIGURE 10.3 – ***Illustration des possibilités pour la modélisation des gouttes créées : grandeurs moyennes ou distributions dynamiques (haut niveau de précision).***

Dans cette étude, nous visons la simulation du point de fonctionnement A-10 du banc Mascotte en régime nominal. Il est donc possible de suivre l'une des deux premières voies. En l'occurrence, bien qu'il serait envisageable de postuler des distributions, nous allons pour l'instant nous contenter de postuler pour l'ensemble des gouttes issues de l'atomisation primaire un unique diamètre moyen, une seule vitesse moyenne, et une seule température

4. On pourrait cependant envisager une version instationnaire de cette approche, applicable en dehors du régime de fonctionnement nominal. Si l'on connait *a priori* l'évolution globale du point de fonctionnement en termes de nombres caractéristiques, il est toujours possible de prédire l'évolution temporelle des grandeurs moyennes.

moyenne. Il s'agit d'une première étape, qui méritera d'être poursuivie vers des niveaux de complexité croissante. En effet, en l'état actuel de notre stratégie basée sur une approche à fluide homogène, il n'est pas encore possible d'aller plus loin dans la modélisation, l'hypothèse d'homogénéité fournissant trop peu d'informations. Notamment, les différentiels de vitesse et de température entre phases ne sont pas connus à l'échelle de sous-maille. Aussi, pour pouvoir disposer de modèles dynamiques et donc augmenter le niveau de modélisation, il sera nécessaire de mettre en œuvre des modèles plus riches, fournissant davantage d'informations locales. Plusieurs pistes sont à explorer en ce sens, parmi lesquelles :

- l'ajout d'une équation sur la ***densité d'aire interfaciale***. Ce type d'approche, présentée en § 3.3.3, pourrait permettre de mettre en place un modèle dynamique pour le diamètre des gouttes créées. Si la modélisation des termes de cette équation n'est pas triviale, il est malgré tout possible de s'appuyer sur les nombreux travaux qui ont été menés sur le sujet.
- la modélisation plus avancée du fluide. Le passage à un modèle à 5 équations fournirait une température propre à la phase liquide du fluide, et permettrait donc de prédire la température des gouttes atomisées. Par ailleurs, un certain nombre de problèmes liés à la fermeture thermodynamique du modèle à 4 équations seraient résolus (cf. Chapitre 5 et Annexe D). Le passage à un modèle à 7 équations fournirait une température, une vitesse et une pression propres à chaque phase. Il serait alors possible de proposer une modélisation de la vitesse des gouttes créées grâce à la connaissance du ***différentiel de vitesse local***. Ce dernier faciliterait également la prédiction du diamètre des gouttes créées, le processus d'atomisation primaire étant fortement conditionné par le nombre de Weber local (cf Chapitre 2).

En l'état actuel, nous nous contentons donc de postuler des propriétés moyennes uniques. Ainsi, toutes les gouttes issues de l'atomisation primaire sont supposées avoir le même diamètre D_{ato}, la même vitesse $\boldsymbol{v}_{ato}$ (tout du moins en norme, voir ci-dessous), et la même température T_{ato}. Afin de choisir des valeurs pertinentes de D_{ato} et $\boldsymbol{v}_{ato}$ au regard des conditions du point de fonctionnement Mascotte A-10, nous pourrions reprendre simplement les résultats présentés au paragraphe § 2.3.4 du Chapitre 2, obtenus à partir de l'analyse de MARMOTTANT et VILLERMAUX [186].

Diamètre Ainsi, nous avions obtenu la valeur approximative de 200 µm pour le diamètre moyen des gouttes en utilisant l'analyse de MARMOTTANT et VILLERMAUX [186]. Cependant, il a également été précisé au paragraphe § 2.3.4 qu'il existe une incertitude très importante dans ce résultat, principalement en raison des conditions réactives. C'est pourquoi nous faisons le choix de prendre ***une valeur légèrement plus élevée*** pour le diamètre des gouttes atomisées, à savoir

$$\boxed{D_{ato} = 250\ \mu\text{m}\,,} \tag{10.13}$$

en espérant d'une certaine manière que le modèle de fragmentation secondaire aura tendance à générer une granulométrie assez peu dépendante de cette condition initiale, dès lors que l'on s'éloignera suffisament en aval de la zone d'atomisation primaire. Évidemment, il conviendra de valider ou d'infirmer cette hypothèse au moment de la simulation numérique, par comparaison avec les données expérimentales (cf. Chapitre 11).

Vitesse En utilisant l'analyse de MARMOTTANT et VILLERMAUX [186], nous avions obtenu l'ordre de grandeur suivant pour la norme de la vitesse des gouttes atomisées :

$$\|\boldsymbol{v}_{ato}\| \approx 10\ \text{m/s}\,. \tag{10.14}$$

Finalement, nous retenons la valeur précise de

$$\boxed{\|\boldsymbol{v}_{ato}\| = 16\ \text{m/s}\,,} \tag{10.15}$$

également corroborée par les données expérimentales disponibles sur la configuration Mascotte (GICQUEL et al. [106]). De plus, nous faisons l'hypothèse que la direction du vecteur vitesse est celle du fluide dans chaque maille, ce qui implique

$$\boxed{\boldsymbol{v}_{ato} = \|\boldsymbol{v}_{ato}\|\frac{\boldsymbol{u}}{\|\boldsymbol{u}\|}\,,} \tag{10.16}$$

où $\boldsymbol{u}$ est le vecteur vitesse du fluide CHARME.

Température Concernant la température, nous avons fait l'hypothèse que l'oxygène liquide est isotherme tant qu'il est traité par le solveur CHARME (cf. Annexe D). Sa température reste donc constante et égale à sa température d'injection, à savoir 85 K. Par conséquent, la température des gouttes atomisées est fixée à cette même valeur :

$$\boxed{T_{ato} = 85 \text{ K}\,.} \tag{10.17}$$

Ainsi, le chauffage de la phase liquide n'intervient qu'à partir du moment où l'atomisation primaire a eu lieu, lorsque l'oxygène se présente sous forme de gouttelettes. Cette hypothèse ne pourra être relaxée que par l'utilisation d'un modèle diphasique plus évolué que le modèle à 4 équations, a minima via le modèle à 5 équations.

10.2.4 Déduction des termes sources correspondants dans SPIREE

D'après les hypothèses retenues, le transfert de masse depuis CHARME ne se fait, dans chaque volume de contrôle, que vers une seule section de SPIREE. De plus, puisque la valeur de D_{ato} est unique, le transfert a toujours lieu vers la même section. Le numéro de cette section particulière, que l'on peut qualifier de "section receveuse", sera noté $N_{\mathcal{P}}$ et vérifie évidemment

$$1 \leq N_{\mathcal{P}} \leq N_s\,, \tag{10.18}$$

où N_s est le nombre de sections. Plus précisément, puisque nous avons choisi de ne pas considérer de termes de coalescence entre gouttes, et puisqu'il y a peu de chances que les gouttes subissent de la condensation dans la configuration Mascotte, la taille des gouttes ne peut a priori que diminuer au cours de leur évolution dans le solveur SPIREE, que ce soit sous l'effet de l'évaporation ou de la fragmentation secondaire. Il parait donc naturel que la section receveuse soit définie comme la dernière section et donc que $N_{\mathcal{P}} = N_s$. Par conséquent, les termes sources liés à l'atomisation primaire qui apparaissent dans les équations de conservation de la masse des différentes sections s'expriment

$$\boxed{\left\{\begin{array}{rcll} \mathcal{P}^{(k)}_{M_A} & = & 0 & \text{si } k \neq N_{\mathcal{P}} \\ \mathcal{P}^{(k)}_{M_A} & = & S^{\,l}_{M_A} & \text{si } k = N_{\mathcal{P}} \end{array}\right.\,.} \tag{10.19}$$

Ce faisant, on perd quelque peu le caractère générique des notations adoptées jusqu'à maintenant. Ainsi, elles ne seront plus d'actualité lorsque l'on s'attachera à prédire des distributions locales (plusieurs sections pourront être receveuses), ou lorsqu'il s'agira de mettre en place un modèle dynamique pour le diamètre moyen D_{ato} (dans ce cas la section receveuse ne sera pas unique). Quoi qu'il en soit, en l'état actuel de notre stratégie, les termes sources de quantité de mouvement liés à l'atomisation primaire s'expriment

$$\boxed{\left\{\begin{array}{rcll} \mathcal{P}^{(k)}_{V_A} & = & 0 & \text{si } k \neq N_{\mathcal{P}} \\ \mathcal{P}^{(k)}_{V_A} & = & \mathcal{P}^{(k)}_{M_A}\, \boldsymbol{v}_{ato} & \text{si } k = N_{\mathcal{P}} \end{array}\right.\,,} \tag{10.20}$$

tandis que les termes sources d'énergie totale s'écrivent

$$\boxed{\left\{\begin{array}{rcll} \mathcal{P}^{(k)}_{E_A} & = & 0 & \text{si } k \neq N_{\mathcal{P}} \\ \mathcal{P}^{(k)}_{E_A} & = & \mathcal{P}^{(k)}_{M_A}\left[c_p\left(T_{ato}\right) + \dfrac{1}{2}\boldsymbol{v}_{ato}\cdot\boldsymbol{v}_{ato}\right] & \text{si } k = N_{\mathcal{P}} \end{array}\right.\,.} \tag{10.21}$$

Finalement, il reste à calculer le terme source correspondant dans l'équation sur la densité en nombre de gouttes de chaque section. Sous l'hypothèse que le diamètre D_{ato} des gouttes atomisées est un diamètre moyen de type D_{30}, il vient

$$\boxed{\left\{\begin{array}{rcll} \mathcal{P}^{(k)}_{N_A} & = & 0 & \text{si } k \neq N_{\mathcal{P}} \\ \mathcal{P}^{(k)}_{N_A} & = & \mathcal{P}^{(k)}_{M_A}\,\dfrac{6}{\rho_0\left(T_{ato}\right)\pi D^3_{ato}} & \text{si } k = N_{\mathcal{P}} \end{array}\right.\,.} \tag{10.22}$$

10.2.5 Lien entre le volume des cellules du maillage et le diamètre des gouttes atomisées

Nous souhaitons ici apporter quelques précisions concernant le lien entre le diamètre des gouttes atomisées et le volume des cellules du maillage. A première vue, il semble en effet légitime de se poser les questions suivantes :

1. Le diamètre des gouttes atomisées peut-il être supérieur au volume de la maille ?
2. Si oui, quelle en est la conséquence sur la signification de grandeurs telles que la densité en nombre de gouttes ou la fraction volumique ?

Ces questions font écho au paragraphe § 3.5 du Chapitre 3 et particulièrement à la problématique illustrée par la Figure 3.6. En effet, notre stratégie implique l'utilisation d'un maillage aussi raffiné que possible dans la zone de coeur liquide, afin de capter un maximum de structures de l'interface liquide-gaz avec le solveur CHARME. Par conséquent, les gouttes créées au moment du transfert de CHARME vers SPIREE ont peu de chances d'avoir un volume qui soit très inférieur à celui de la maille, ce qui peut donner l'impression d'une incohérence avec l'hypothèse de phase dispersée.

Comme nous l'avons déjà expliqué, quel que soit le raffinement du maillage utilisé, l'interface liquide-gaz se retrouve toujours diffusée sur une épaisseur de quelques mailles, c'est le principe des modèles à interface diffuse. Or, le modèle de couplage a été construit de telle sorte que le transfert soit réalisé "au bord" de la zone de diffusion numérique, c'est-à-dire dans les mailles où la fraction volumique de la phase liquide dans CHARME est faible (cf. Figure 10.5). Par conséquent, la masse de liquide qui est effectivement transférée en un pas de temps dans un volume de controle donné, que l'on note m_{ato}, est le résultat de l'opération

$$m_{ato} = S^{l}_{M_A} \Delta t \mathcal{V}_c \, , \tag{10.23}$$

où Δt et $\mathcal{V}_c$ sont respectivement le pas de temps d'intégration et le volume de la maille. De même, la masse volumique transférée au cours du pas de temps, quantité indépendante du volume de la cellule, s'exprime

$$\rho_{ato} = S^{l}_{M_A} \Delta t = m_{ato}/\mathcal{V}_c \, . \tag{10.24}$$

Il est clair que les grandeurs m_{ato} et ρ_{ato} ***peuvent être arbitrairement faibles***, et donc tendre vers zéro. Pour autant, lorsque la masse de liquide parvient dans le solveur SPIREE, elle est sensée représenter un ensemble de gouttes dont le diamètre moyen D_{ato} est ***fixé par la physique du processus d'atomisation***, et n'est donc absolument pas arbitraire. Le diamètre D_{ato} ***est donc indépendant*** de la masse transférée m_{ato}, et il est également ***indépendant du volume de la cellule*** (voir l'illustration de la Figure 10.4). Ainsi, la fraction volumique "injectée" dans le solveur SPIREE au moment du transfert, que l'on note α_{ato} et qui s'exprime

$$\alpha_{ato} = \frac{\rho_{ato}}{\rho_0 \left(T_{ato} \right)} = \frac{S^{l}_{M_A} \Delta t}{\rho_0 \left(T_{ato} \right)} \, , \tag{10.25}$$

est indépendante du volume de la cellule et il n'y a pas d'ambiguïté quant à sa signification. Elle est forcément très inférieure à 1 d'après l'expression du terme $S^{l}_{M_A}$ (en particulier celle de la fonction d'efficacité λ_A), et sous réserve évidemment que le pas de temps d'intégration soit bien adapté. Enfin, la densité en nombre de gouttes "injectée " dans le solveur SPIREE au moment du transfert, notée n_{ato}, s'exprime

$$n_{ato} = \frac{6\alpha_{ato}}{\pi D^3_{ato}} \approx 1.22 \times 10^{11} \alpha_{ato} \, , \tag{10.26}$$

avec la valeur postulée précédemment de $D_{ato} = 250$ µm. La grandeur n_{ato} désigne le nombre de gouttes atomisées au cours du pas de temps, sous les conditions du volume de contrôle local, mais rapporté à un volume de 1 m^3. Par conséquent, le nombre effectif de gouttes atomisées dans le volume de contrôle local au cours du pas de temps, que l'on note par exemple N_{ato}, est obtenu comme

$$N_{ato} = n_{ato} \mathcal{V}_c = \frac{\mathcal{V}_c}{\mathcal{V}_{ato}} \alpha_{ato} \, , \tag{10.27}$$

où $\mathcal{V}_{ato} = \pi D^3_{ato}/6$ désigne le volume d'une goutte atomisée. Ainsi, ce nombre peut très bien être inférieur à 1 si

$$\alpha_{ato} < \frac{\mathcal{V}_{ato}}{\mathcal{V}_c} \, . \tag{10.28}$$

Pour autant, cela ne pose aucun problème particulier. Il faut bien comprendre que la modélisation de la phase dispersée repose sur une ***description statistique***, formalisée à la base par l'équation cinétique (cf. Chapitre 3) qui décrit l'évolution d'une ***densité de probabilité*** en nombre de gouttes. L'équation cinétique est ensuite intégrée

sur les variables vitesse et température de l'espace des phases, puis discrétisée par rapport aux autres dimensions (temps, position, taille). Ainsi, la finesse du maillage conditionne uniquement la discrétisation de l'une des dimensions de l'espace des phases, en l'occurrence celle de l'espace physique. Disposer d'un maillage très fin, dont la taille des éléments est potentiellement inférieure à celle des gouttes n'est donc pas problématique (si ce n'est éventuellement pour des raisons de coût de calcul). La donnée conjointe de D_{ato} et m_{ato} (ou α_{ato}) dans un élément du maillage de volume $\mathcal{V}_c$ très petit doit donc s'interpréter comme la ***probabilité*** de trouver, à l'instant t présent, une goutte de diamètre D_{ato} dans l'***élément de volume infinitésimal*** $\mathcal{V}_c$. Le lecteur intéressé par des explications plus détaillées sur ces considérations statistiques est invité à consulter SIRIGNANO [253, 254] et JAY et al. [149].

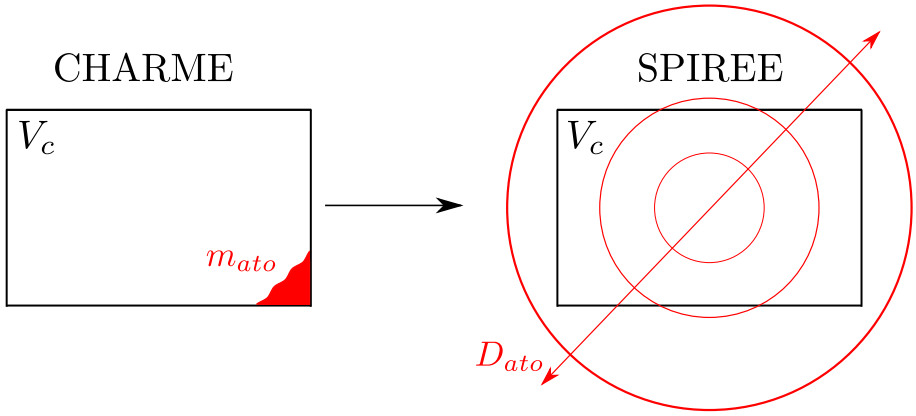


FIGURE 10.4 – ***Illustration de l'indépendance du diamètre des gouttes atomisées à la masse transférée et au volume des cellules du maillage.***

En conclusion de ce paragraphe, il nous parait important de souligner une conséquence intéressante de ce qui vient d'être expliqué. En effet, il semblerait que l'on mette en évidence ici l'un des avantages majeurs de l'approche eulérienne par rapport à l'approche lagrangienne pour le type de couplage diphasique que nous mettons en place :

> Supposons qu'une méthode lagrangienne se substitue à l'approche eulérienne dans notre stratégie de couplage. Au moment de fixer les conditions initiales d'une particule lagrangienne issue du transfert, rien n'interdirait a priori de lui affecter une masse m_{ato} arbitrairement faible et indépendante de son diamètre D_{ato}. Dans ce cas, la particule lagrangienne représenterait statistiquement un nombre de gouttes inférieur à 1, exactement de la même manière que dans le cas du couplage eulérien. Suivant cette idée, il serait donc possible de réaliser le transfert de manière progressive, itération après itération, et ainsi de limiter les problèmes de variation de pression évoqués précédemment. Malheureusement, cela parait totalement inabordable en pratique, dans la mesure où il faudrait suivre un nombre de particules lagrangiennes supérieur au nombre de gouttes réelles. Or, les méthodes lagrangiennes procèdent généralement de manière diamètralement opposée, une particule lagrangienne devant plutôt être la représentation statistique d'un très grand nombre de gouttes. Dans ce cas, le couplage entre le solveur CHARME et un solveur lagrangien impliquerait un transfert de masse moins fréquent mais beaucoup plus important, causant probablement des variations de pression significatives.

10.2.6 Remarque sur la conservation de la quantité de mouvement

Il est important de préciser encore une fois que l'ensemble du couplage CHARME-SPIREE est ***complètement conservatif***, en masse, quantité de mouvement et énergie. Cette précision appelle une remarque importante quant à la conservation de la quantité de mouvement. En effet, il faut noter que la valeur postulée pour la vitesse des gouttes atomisées est très inférieure à la vitesse du fluide CHARME dans les volumes de contrôle où se produit le transfert, ce qui peut s'écrire

$$\|\boldsymbol{v}_{ato}\| \ll \|\boldsymbol{u}\|_{Y_l \to 0} \,, \tag{10.29}$$

où $\|\boldsymbol{u}\|_{Y_l \to 0}$ désigne l'ordre de grandeur de la vitesse du fluide CHARME dans une maille de calcul située sur le bord de l'interface diffuse, c'est-à-dire dans la zone où la fonction d'efficacité λ_A permet le transfert. Dans cette zone, il se trouve que l'unique vitesse moyenne pour le fluide est bien plus proche de la vitesse du jet d'hydrogène gazeux que de celle du jet d'oxygène liquide (voir la Figure 10.5 pour illustration). L'idée qui consisterait à fixer la vitesse des gouttes atomisées comme étant celle du fluide CHARME dans le volume de contrôle local est donc

totalement à proscrire (du moins dans la configuration de jet assisté qui nous intéresse). En effet, cette configuration implique les ordres de grandeur suivants (voir le Tableau 1.2 du Chapitre 1) :

$$U_{GH_2} \approx 300 \text{ m/s}, \quad U_{LOx} \approx 2 \text{ m/s}, \quad \|\boldsymbol{u}\|_{Y_l \to 0} \approx 100 \text{ m/s} , \tag{10.30}$$

où U_{GH_2} et U_{LOx} sont les vitesses d'injection respectives de l'hydrogène gazeux et de l'oxygène liquide, et nous avons fixé la vitesse des gouttes atomisées à

$$\|\boldsymbol{v}_{ato}\| = 16 \text{ m/s} . \tag{10.31}$$

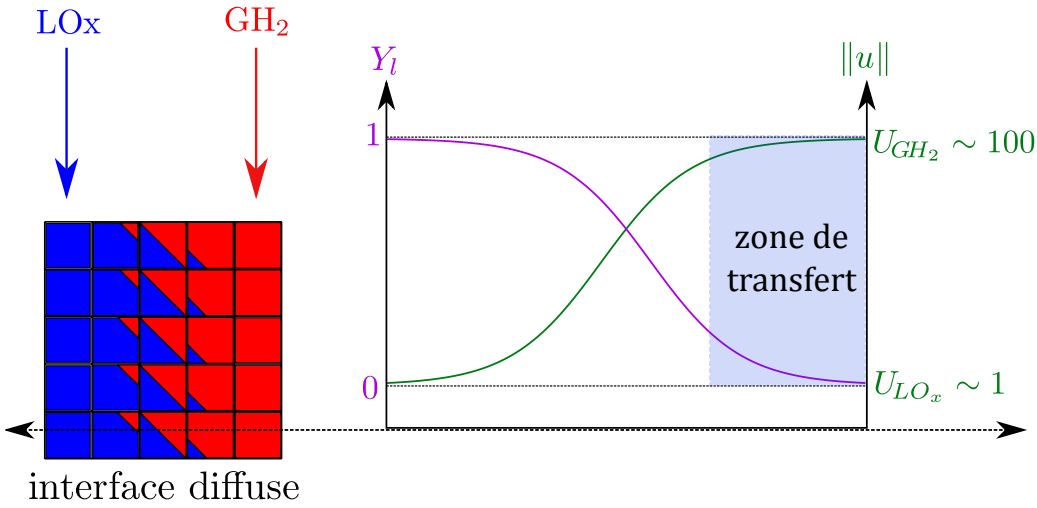


FIGURE 10.5 – *Représentation schématique des profils de vitesse et de fraction massique de liquide à travers l'interface diffuse.*

Par conséquent, il en résulte que la quantité de mouvement effectivement prélevée dans le solveur CHARME au moment du transfert, en l'occurrence

$$S^l_{M_A} \Delta t \, \boldsymbol{v}_{ato} , \tag{10.32}$$

ne correspond pas à la quantité de mouvement qui aurait été transférée si l'on avait considéré la vitesse du fluide comme condition initiale des gouttes créées, à savoir

$$S^l_{M_A} \Delta t \, \boldsymbol{u} . \tag{10.33}$$

Ceci a donc pour effet d'accélérer le fluide CHARME amputé de sa masse liquide $S^l_{M_A} \Delta t$, puisque nous avons schématiquement au cours de l'avancement en temps entre les itérations n et $n+1$:

$$\|\boldsymbol{u}^{n+1}\| = \frac{\|(\rho \boldsymbol{u})^{n+1}\|}{\rho^{n+1}} \propto \frac{\|(\rho \boldsymbol{u})^n\| - S^l_{M_A} \Delta t \|\boldsymbol{v}_{ato}\|}{\rho^n - S^l_{M_A} \Delta t} , \tag{10.34}$$

et donc :

$$\frac{\|\boldsymbol{u}^{n+1}\|}{\|\boldsymbol{u}^n\|} \propto \frac{\|(\rho \boldsymbol{u})^n\| - S^l_{M_A} \Delta t \|\boldsymbol{v}_{ato}\|}{\|(\rho \boldsymbol{u})^n\| - S^l_{M_A} \Delta t \|\boldsymbol{u}^n\|} > 1 , \tag{10.35}$$

puisque

$$\|\boldsymbol{v}_{ato}\| < \|\boldsymbol{u}^n\| . \tag{10.36}$$

Ce comportement n'est pas problématique. Au contraire, il corrige d'une certaine manière la perte d'information générée par l'homogénéisation des vitesses des deux phases dans CHARME.

10.3 Modélisation du transfert par pseudo-coalescence

Nous présentons à présent la modélisation du terme de pseudo-coalescence, décrivant un transfert liquide-liquide depuis le solveur SPIREE vers le solveur CHARME. Rappelons que l'on a introduit l'expression "pseudo-coalescence" de manière à ne pas faire de confusion avec les phénomènes de coalescence entre gouttes, même si nous avons fait le choix de ne pas les prendre en compte dans cette étude. Le terme de pseudo-coalescence a vocation à décrire deux phénomènes physiques différents, à savoir :

1. ***l'impact de gouttes sur le jet*** (ou inversement). En pratique, il est tout à fait envisageable que des gouttes fusionnent avec le coeur liquide dense, par exemple sous l'effet d'un battement du jet liquide, ou encore parce que des gouttes se retrouvent entrainées par un tourbillon de l'écoulement gazeux qui viendrait impacter le jet. Dans ces deux cas de figure, il n'y a aucune raison de continuer à décrire cette masse de liquide avec le solveur SPIREE. En effet, cela revient à considérer une phase dispersée liquide dont le fluide porteur est composé d'une phase liquide pure de même nature que la phase dispersée. Cela n'a évidemment aucun sens, d'autant plus lorsqu'on imagine ce que peuvent engendrer dans ce cas les termes sources de couplage avec une phase porteuse qui est normalement gazeuse (force de traînée, évaporation).
2. ***l'accumulation locale de gouttes***, c'est-à-dire l'augmentation importante de la fraction volumique, au-delà de la validité de l'hypothèse de phase dispersée. Les accumulations de gouttes peuvent être d'origine ***numérique*** mais également ***physique***. Dans le premier cas, elles sont liées à la structure mathématique du système d'équations de la phase dispersée. Comme nous l'avons déjà vu (cf. Chapitre 3 et Chapitre 8), l'absence de terme de pression dans les équations de la phase dispersée est susceptible de générer des δ-chocs, et donc des accumulations de nature purement numérique. Sur des maillages très raffinés, l'ampleur de ces accumulations peut être telle que la fraction volumique atteint localement des valeurs très élevées, susceptibles de mettre à mal la robustesse des simulations (cf. § 10.5).

   Le second cas (accumulations d'origine physique) ne concerne pas directement notre étude et les configurations telles que Mascotte. Cependant, il peut se produire dans d'autres applications, par exemple dès lors qu'elles impliquent une phase dispersée venant impacter une paroi. Dans ce cas de figure, il peut se former un film liquide ruisselant sur la paroi, voire une masse d'eau compacte d'épaisseur plus importante. Il convient alors de mettre en œuvre un couplage entre solveurs pour conserver une description correcte des phénomènes physiques, le solveur SPIREE n'étant plus adapté. Dans le cas du code CEDRE, un couplage avec le solveur FILM (cf. Chapitre 4) est possible tant que l'épaisseur du film liquide est suffisament mince pour que la modélisation de type "shallow water" (VREUGDENHIL [296]) soit valide. Lorsque ce n'est plus le cas, un couplage avec le solveur CHARME tel que celui que nous proposons ici semble pertinent.

Évidemment, on aura noté que ces deux phénomènes ne sont pas complètement découplés. Si des gouttes s'accumulent en l'absence initiale d'une phase liquide compacte, cette accumulation génère une phase liquide compacte, et donc l'accumulation ultérieure s'apparente à de l'impact.

Par ailleurs, exactement pour les mêmes raisons que dans le cas de l'atomisation primaire (cf. § 10.2.2), il est primordial de réaliser le transfert entre solveurs de manière la plus progressive possible, et au sein de volumes de contrôle où la fraction volumique de la phase liquide dans CHARME est la plus faible possible. Dans le cas contraire, la variation de la densité moyenne du fluide s'accompagne inévitablement d'une importante variation de pression en raison de la très faible compressibilité de la phase liquide par rapport à celle du gaz. Cet effet sera analysé et quantifié au paragraphe § 10.4. Sur la base de toutes ces considérations, nous proposons la formulation suivante des termes de pseudo-coalescence :

$$\boxed{\mathcal{P}^{(k)}_{M_C} = \rho^{(k)}\, f_C\, \lambda^{(k)}_C\left(\alpha_l, \alpha^{(k)}\right), \quad 1 \leq k \leq N_s\,,} \tag{10.37}$$

où $\rho^{(k)} = \alpha^{(k)}\rho^{(k)}_0$ est la masse volumique effective de la section k, $\alpha^{(k)}$ et $\rho^{(k)}_0$ désignant respectivement sa fraction volumique et sa masse volumique thermodynamique. De plus, f_C est une fréquence caractéristique, tandis que $\lambda^{(k)}_C$ est la fonction d'efficacité, supposée dépendre ici de $\alpha^{(k)}$ et de la fraction volumique de la phase liquide dans CHARME, notée α_l.

10.3.1 Fréquence caractéristique

La fréquence caractéristique f_C est exprimée en fonction du pas temps d'intégration des termes sources Δt selon

$$\boxed{f_C = (N_C\, \Delta t)^{-1}\,,} \tag{10.38}$$

où $N_C \geq 1$ est un paramètre de relaxation. Une valeur de $N_C = 1$ implique une fréquence caractéristique égale à l'inverse du pas de temps d'intégration, et conduit donc potentiellement à transférer l'ensemble de la masse de la section en un pas de temps si la fonction d'efficacité prend sa valeur maximale de 1. Il s'agit du choix retenu pour la simulation du Chapitre 11.

10.3.2 Forme de la fonction d'efficacité

La fonction d'efficacité est modélisée de la manière suivante :

$$\boxed{\lambda_C^{(k)} = 1 - \tanh\left(-c_\lambda \log_{10}\left[\max\left(\alpha_l, \alpha^{(k)}\right)\right]\right)\,,} \tag{10.39}$$

où la valeur de la constante c_λ a été fixée à

$$\boxed{c_\lambda = 2\,,} \tag{10.40}$$

sans qu'une étude paramétrique sur l'influence de ce paramètre n'ait pu être menée. La forme correspondante de $\lambda_C^{(k)}$ est représentée sur la Figure 10.6 en fonction de $\max\left(\alpha_l, \alpha^{(k)}\right)$. Ainsi, la fonction d'efficacité est nulle pour de faibles valeurs des deux fractions volumiques, puis augmente à mesure que l'une ou l'autre des fractions volumiques tend vers 1. Il est évidemment indispensable que cette fonction d'efficacité ne vienne pas annuler l'effet de son homologue λ_A, dédiée au transfert inverse. Ce n'est pas le cas dans la mesure où les zones d'activité maximale respectives de ces deux fonctions sont situées aux deux extrémités de l'interface diffuse (cf. Figure 10.1 et Figure 10.6). Notons tout de même que lorsque l'on compare la Figure 10.1 et la Figure 10.6, il faut prendre garde au fait que λ_A et $\lambda_C^{(k)}$ dépendent respectivement de la fraction massique et de la fraction volumique. Or ces deux grandeurs ne dépendent pas linéairement l'une de l'autre [5].

Ainsi, le taux de transfert par pseudo-coalescence est d'autant plus important :

- que la fraction volumique de liquide dans CHARME est élevée, indépendamment de celle de la phase dispersée. Cela signifie que quelle que soit la concentration locale des gouttes, celles-ci ont vocation à être transférées vers le fluide à partir du moment où il est majoritairement composé de liquide.
- que la fraction volumique de la phase dispersée est élevée, indépendamment de celle du liquide dans CHARME. Même lorsqu'il n'existe initialement pas de masse de liquide compacte, une accumulation de gouttes tend à générer cette masse de liquide compacte et le solveur CHARME doit donc prendre le relais du solveur SPIREE.

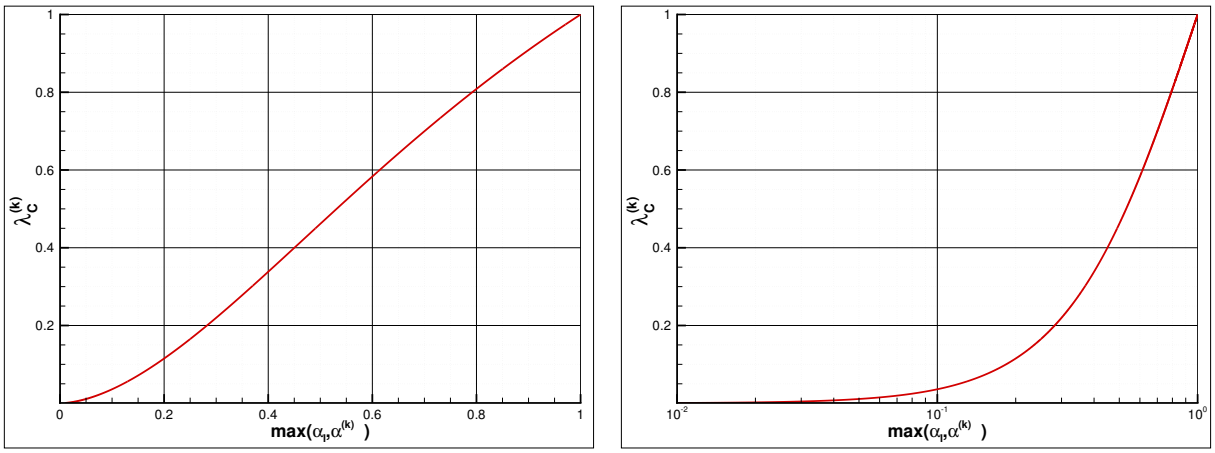


FIGURE 10.6 – *Forme de la fonction d'efficacité $\lambda_C^{(k)}$. Échelle linéaire (gauche) et logarithmique (droite).*

Application éventuelle d'une limitation

Nous avons expliqué précédemment que le transfert entre solveurs devait être réalisé de manière très progressive, et dans la mesure du possible au sein de volumes de contrôle où la fraction volumique de la phase liquide dans CHARME est faible, ou au moins inférieure à 1. Ceci est indispensable pour éviter des variations de pression trop importantes dues à la très faible compressibilité de la phase liquide, comme l'illustrera l'analyse du paragraphe § 10.4. Par conséquent, le cas de la pseudo-coalescence est plus dangereux que celui de l'atomisation primaire, dans la mesure où le sens physique du modèle de pseudo-coalescence conduit à opérer le transfert dans des mailles

5. En effet, considérons le mélange d'une phase liquide et d'une phase gazeuse de masses volumiques respectives ρ_l et ρ_g. La fraction volumique s'exprime en fonction de la fraction massique comme $\alpha_l = \rho_g Y_l / \left[\rho_l + Y_l\left(\rho_g - \rho_l\right)\right]$, tandis que l'on a réciproquement $Y_l = \alpha_l \rho_l / \left[\alpha_l \rho_l + (1-\alpha_l)\rho_g\right]$.

où la fraction volumique de liquide dans CHARME est importante. Cependant, puisqu'en pratique les interfaces sont diffuses, il est raisonnable d'espérer que le transfert de SPIREE vers CHARME puisse être réalisé principalement dans des mailles de mélange, où la fraction volumique de liquide dans CHARME reste inférieure à 1. Néanmoins, par sécurité, il est peut-être préférable d'imaginer une limitation du taux de transfert dans le cas où la fraction volumique de liquide dans CHARME s'approche trop de la valeur 1. On note ainsi $\widetilde{\mathcal{P}^{(k)}_{M_C}}$ le terme source de transfert limité, que l'on exprime

$$\boxed{\widetilde{\mathcal{P}^{(k)}_{M_C}} = \chi\, \mathcal{P}^{(k)}_{M_C}\ ,} \tag{10.41}$$

en écrivant le coefficient de limitation χ sous la forme

$$\boxed{\chi = \min\left[1, \rho_l\,(1-\alpha_l)\left(\Delta t \sum_{k=1}^{N_s} \mathcal{P}^{(k)}_{M_C}\right)^{-1}\right]\ ,} \tag{10.42}$$

où ρ_l est la masse volumique thermodynamique de la phase liquide dans CHARME, fonction de la pression et de la température locales via la loi d'état de liquide compressible (cf. relation (5.124) du Chapitre 5). L'influence du coefficient de limitation est nulle tant que le pas de temps d'intégration, la somme des taux de transferts, et la fraction volumique de la phase liquide dans CHARME sont tels que

$$\Delta t \sum_{k=1}^{N_s} \mathcal{P}^{(k)}_{M_C} \leq \rho_l\,(1-\alpha_l)\ . \tag{10.43}$$

Dans le cas contraire, le coefficient de limitation devient actif et permet d'éviter des variations de pression trop importantes. En contrepartie, puisque toute la masse de liquide contenue dans SPIREE ne peut plus être transférée vers CHARME, on ne peut éviter qu'une certaine masse de gouttes se retrouve portée par un fluide purement liquide.

10.3.3 Déduction des autres termes sources liés à la pseudo-coalescence

Comme nous l'avions précisé au paragraphe § 10.1, une fois que l'on connait l'expression des termes $\mathcal{P}^{(k)}_{M_C}$, les termes $\mathcal{P}^{(k)}_{V_C}$, $\mathcal{P}^{(k)}_{E_C}$ et $\mathcal{P}^{(k)}_{N_C}$ sont simplement déduits à partir des valeurs locales des grandeurs moyennes de chaque section (diamètre, vitesse et température) :

$$\boxed{\left\{\begin{array}{rcl} \mathcal{P}^{(k)}_{V_C} & = & \mathcal{P}^{(k)}_{M_C}\, \boldsymbol{v}^{(k)} \\ \mathcal{P}^{(k)}_{E_C} & = & \mathcal{P}^{(k)}_{M_C}\left[c_p\left(\theta^{(k)}\right) + \dfrac{1}{2}\boldsymbol{v}^{(k)}\cdot\boldsymbol{v}^{(k)}\right] \\ \mathcal{P}^{(k)}_{N_C} & = & \mathcal{P}^{(k)}_{M_C}\, \dfrac{6}{\rho_0\left(\theta^{(k)}\right)\pi D^{(k)^3}} \end{array}\right.\ .} \tag{10.44}$$

Concernant les termes sources correspondant dans CHARME, on obtient $S^{\,l}_{M_C}$ par sommation sur les sections des termes $\mathcal{P}^{(k)}_{M_C}$, tandis que les contributions aux termes $\boldsymbol{S_U}$ et S_E sont obtenues par sommation des termes $\mathcal{P}^{(k)}_{V}$ et $\mathcal{P}^{(k)}_{E}$.

10.4 Analyse de la variation de pression générée par le transfert CHARME-SPIREE

Les paragraphes précédents ont présenté la modélisation retenue pour les termes sources $S^{\,l}_{M_A}$ et $S^{\,l}_{M_C}$, apparaissant dans l'équation de conservation de la masse de liquide dans le solveur CHARME. Il a été souligné que l'ensemble de la stratégie de couplage était totalement conservative en masse, quantité de mouvement et énergie, mais qu'elle ne l'était inévitablement pas en volume du point de vue de CHARME. En effet, le volume de la phase dispersée n'est pas pris en compte dans la partie convective des équations du fluide, et par conséquent ***la variation de masse qui survient au moment du transfert entre solveurs n'est pas accompagnée d'une variation de volume***

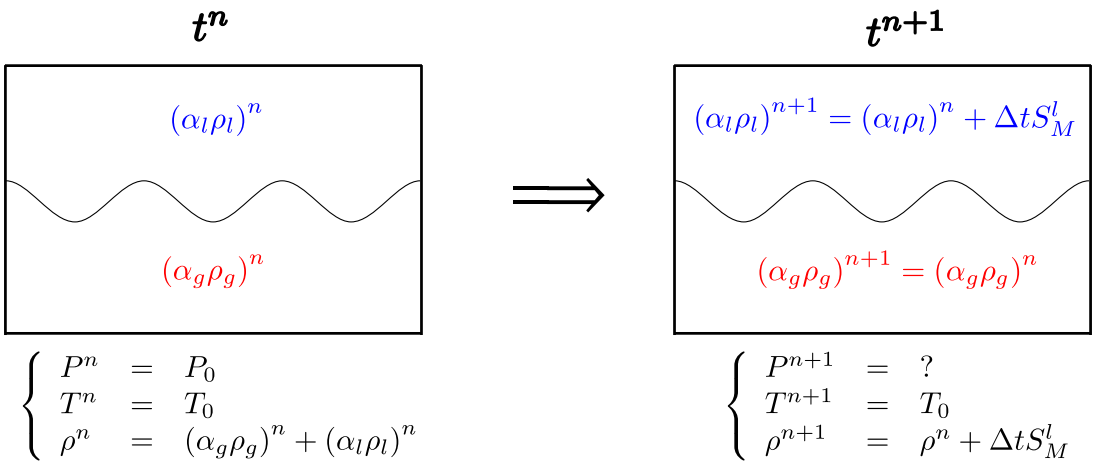


FIGURE 10.7 – ***Schéma de principe du cas étudié pour l'analyse de la variation de pression.***

dans CHARME. La masse volumique du fluide est donc modifiée, ce qui occasionne inévitablement une variation de pression non physique, que nous allons chercher à quantifier et analyser dans ce paragraphe.

Pour cela, nous allons considérer un cas simplifié de manière à évaluer uniquement l'influence des termes sources de transfert liquide-liquide. A noter que ce cas peut être reproduit avec CEDRE, ce qui nous a permis de vérifier numériquement la validité de l'analyse qui va suivre. Le domaine de calcul est constitué d'une seule maille rectangulaire (cf. Figure 10.7). Le fluide CHARME est uniquement constitué d'une espèce gazeuse et d'une espèce liquide. Il est initialement immobile, soumis à une pression P_0 et une température T_0. Les termes de transport et de diffusion dans les équations sont inopérants. La phase dispersée éventuellement présente à l'état initial est supposée être en équilibre thermique et dynamique avec le fluide. Elle est également inerte (pas d'évaporation). Le seul terme source pris en compte dans CHARME est donc celui qui traduit un transfert entre l'espèce liquide du fluide et la phase dispersée. Pour simplifier encore l'analyse, nous supposerons que les transferts par atomisation primaire et pseudo-coalescence ne cohabitent pas, et on aura donc soit $S_M^l = -S_{M_A}^l$, soit $S_M^l = S_{M_c}^l$. Les équations de conservation pour la quantité de mouvement et l'énergie totale du fluide sont donc inutiles, l'évolution du fluide sur une itération étant simplement régie par les équations suivantes :

$$\boxed{\begin{cases} \partial_t\left(\alpha_g\rho_g\right) = 0 \\ \partial_t\left(\alpha_l\rho_l\right) = S_M^l \end{cases},} \tag{10.45}$$

associées à une relation thermodynamique du type $P = f(\rho)$ pour l'actualisation de la pression. On préfère raisonner ici avec les fractions volumiques, mais cette formulation est équivalente à celle avec les fractions massiques utilisée au Chapitre 5. Nous avons en effet :

$$\alpha_g\rho_g = \rho Y_g\,, \quad \alpha_l\rho_l = \rho Y_l\,, \tag{10.46}$$

où les masses volumiques thermodynamiques ρ_g et ρ_l sont reliées à la température et la pression, respectivement via la loi d'état des gaz parfaits et la loi d'état de liquide compressible (cf. relations (5.111) et (5.124) au Chapitre 5). Si l'on procède à l'avancement en temps du système (10.45) par une méthode d'Euler explicite, il vient :

$$\begin{cases} \left(\alpha_g\rho_g\right)^{n+1} = \left(\alpha_g\rho_g\right)^n \\ (\alpha_l\rho_l)^{n+1} = (\alpha_l\rho_l)^n + \Delta t S_M^l \end{cases} \quad \Longrightarrow \quad \rho^{n+1} = \left(\alpha_g\rho_g\right)^{n+1} + (\alpha_l\rho_l)^{n+1} = \rho^n + \Delta t S_M^l\,. \tag{10.47}$$

Il reste alors à calculer la valeur de la pression actualisée P^{n+1}. Pour cela, nous allons utiliser les définitions thermodynamiques introduites au Chapitre 5 et également utilisées dans l'analyse de l'Annexe D. D'après le paragraphe § 5.5.5, nous pouvons écrire

$$P^{n+1} = \rho^{n+1}\mathcal{R}^{n+1}T^{n+1}\,, \tag{10.48}$$

avec

$$\mathcal{R}^{n+1} = Y_g^{n+1}\mathcal{R}_g^{n+1} + Y_l^{n+1}\mathcal{R}_l^{n+1}\,, \tag{10.49}$$

et

$$\mathcal{R}_g^{n+1} = r_g = \frac{R}{M_g}\,, \tag{10.50}$$

où R et M_g sont respectivement la constante des gaz parfaits et la masse molaire de l'espèce gazeuse, et avec

$$\mathcal{R}_l^{n+1} = \frac{P^{n+1}}{\rho_0 T^{n+1}} \frac{1+\alpha_0(T^{n+1}-T_0)}{1+\beta_0(P^{n+1}-P_0)}\,, \tag{10.51}$$

où α_0 et β_0 sont les coefficients thermoélastiques de dilatation isobare et de compressibilité isotherme, définis à l'état de référence (P_0, T_0, ρ_0). On suppose ici que l'état initial $t = t^n$ pour le liquide coïncide avec l'état de référence :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \rho_0 & = & \rho_l^n \\ P_0 & = & P^n \\ T_0 & = & T^n \end{array} \right. . \tag{10.52}$$

De plus, nous avons $T^{n+1} = T^n = T_0$, ce qui permet de réécrire

$$\mathcal{R}_l^{n+1} = \frac{P^{n+1}}{\rho_l^n T_0} \frac{1}{1+\beta_0\left(P^{n+1}-P^n\right)}\,. \tag{10.53}$$

En réintroduisant les fractions volumiques via la relation (10.46), il vient ensuite

$$P^{n+1} = \alpha_g^n \rho_g^n r_g T_0 + \frac{P^{n+1}}{1+\beta_0\left(P^{n+1}-P^n\right)} \frac{\alpha_l^n \rho_l^n + \Delta t S_M^l}{\rho_l^n}\,, \tag{10.54}$$

soit finalement

$$\boxed{\frac{P^{n+1}}{P^n} = 1 - \alpha_l^n + z \frac{P^{n+1}/P^n}{1+\beta_0 P^n\left(P^{n+1}/P^n - 1\right)}\,,} \tag{10.55}$$

avec

$$\boxed{z = \frac{\alpha_l^n \rho_l^n + \Delta t S_M^l}{\rho_l^n}\,.} \tag{10.56}$$

On introduit alors le changement de variable

$$\boxed{X = \frac{P^{n+1}}{P^n}\,,} \tag{10.57}$$

et on montre après quelques lignes de calcul que la variable X est solution du polynôme du second degré :

$$\boxed{aX^2 + bX + c = 0\,,} \tag{10.58}$$

avec

$$\boxed{\left\{ \begin{array}{rcl} a & = & \beta_0 P^n \\ b & = & 1 - \beta_0 P^n\left(2-\alpha_l^n\right) - z \\ c & = & -\left(1-\alpha_l^n\right)\left(1-\beta_0 P^n\right) \end{array} \right. .} \tag{10.59}$$

A ce stade de l'analyse, il reste à écrire que le terme $\Delta t\, S_M^l$ peut être :

- négatif dans le cas de l'atomisation primaire ($S_M^l = -S_{M_A}^l$). Dans ce cas, sa valeur absolue est majorée par $(\alpha_l \rho_l)^n$, la masse totale de liquide présente dans CHARME à l'instant t^n (cas limite où toute la masse liquide serait transférée en un pas de temps).
- positif dans le cas de la pseudo-coalescence ($S_M^l = S_{M_C}^l$). Dans ce cas, il est majoré par la masse totale de liquide présente dans SPIREE à l'instant t^n (cas limite où toute la masse liquide serait transférée en un pas de temps).

Supposons que la masse volumique thermodynamique des sections à l'instant t^n soit identique et égale à celle du liquide dans CHARME, c'est-à-dire que

$$\forall k \quad \rho_0^{(k),n} = \rho_l^n \,. \tag{10.60}$$

Notons par ailleurs

$$\alpha_{tot}^n = \sum_{k=1}^{N_s} \alpha^{(k),n} \,, \tag{10.61}$$

la fraction volumique totale de la phase dispersée à l'instant t^n, que l'on suppose (arbitrairement) majorée par 1. Il est alors possible d'écrire

$$\boxed{\Delta t S_M^l = \xi \rho_l^n \,,} \tag{10.62}$$

où ξ désigne la ***fraction volumique de liquide transférée***, que ce soit dans un sens ou dans l'autre, et qui est telle que

$$\boxed{-1 \leq -\alpha_l^n \leq \xi \leq \alpha_{tot}^n \leq 1 \,.} \tag{10.63}$$

Le paramètre z se réécrit donc

$$\boxed{z = \alpha_l^n + \xi \,.} \tag{10.64}$$

Nous venons d'établir les formules qui expriment la variation de pression (via le changement de variable X) en fonction des deux variables :

- α_l^n, la fraction volumique initiale de liquide dans CHARME,
- ξ, la fraction volumique de liquide transférée entre les solveurs,

et en fonction également des données thermodynamiques suivantes :

- β_0, le coefficient de compressibilité isotherme de la phase liquide,
- P^n, la pression initiale,
- ρ_l^n, la masse volumique de la phase liquide.

Nous allons ensuite considérer deux jeux de données pour β_0, P^n et ρ_l^n, l'un représentatif d'un mélange diphasique air-eau à pression ambiante, et l'autre d'un mélange diphasique hydrogène-oxygène à une pression de 10 bar. Nous allons montrer que pour ces deux cas le polynôme (10.58) possède toujours au moins une racine réelle, et que lorsque les racines sont au nombre de 2, celle qui a physiquement un sens est toujours bien déterminée. Il est alors possible de tracer cette racine "physique", que l'on note X_1, en fonction de ξ et pour différentes valeurs de α_l^n.

Mélange diphasique air-eau

Les données thermodynamiques retenues pour le mélange air-eau sont les suivantes (unités S.I.) :

$$\begin{cases} \beta_0 &= 5 \times 10^{-10} \\ P^n &= 10^5 \\ \rho_l^n &= 10^3 \end{cases} \,. \tag{10.65}$$

Il faut d'abord s'assurer que l'équation du second degré (10.58) admet des solutions réelles. Nous commençons donc par tracer la valeur du discriminant $\Delta = b^2 - 4ac$ pour différentes valeurs de α_l^n comprises entre 0 et 1, et pour ξ variant entre $-\alpha_l^n$ et 1 (cf. Figure 10.8). Il apparait que pour $\alpha_l^n < 1$, nous avons toujours $\Delta > 0$, et par conséquent le polynôme admet deux racines réelles distinctes

$$X_1 = \frac{-b + \sqrt{\Delta}}{2a} \,, \quad X_2 = \frac{-b - \sqrt{\Delta}}{2a} \,, \tag{10.66}$$

dont on peut montrer par ailleurs qu'elles sont telles que $X_1 > 0$ et $X_2 < 0$. Pour $\alpha_l^n = 1$, il existe une valeur $\xi_0 = -\beta_0 P^n = -5 \times 10^{-5}$ pour laquelle on a $\Delta = 0$. Le polynôme admet dans ce cas une racine double, en l'occurrence $X_1 = X_2 = 0$. Pour $\alpha_l^n = 1$ et $\xi \neq \xi_0$, on observe que

$$\text{si } \xi > \xi_0 \quad \text{alors} \quad \begin{cases} X_1 > 0 \\ X_2 = 0 \end{cases}, \qquad \text{et si } \xi < \xi_0 \quad \text{alors} \quad \begin{cases} X_1 = 0 \\ X_2 < 0 \end{cases}. \tag{10.67}$$

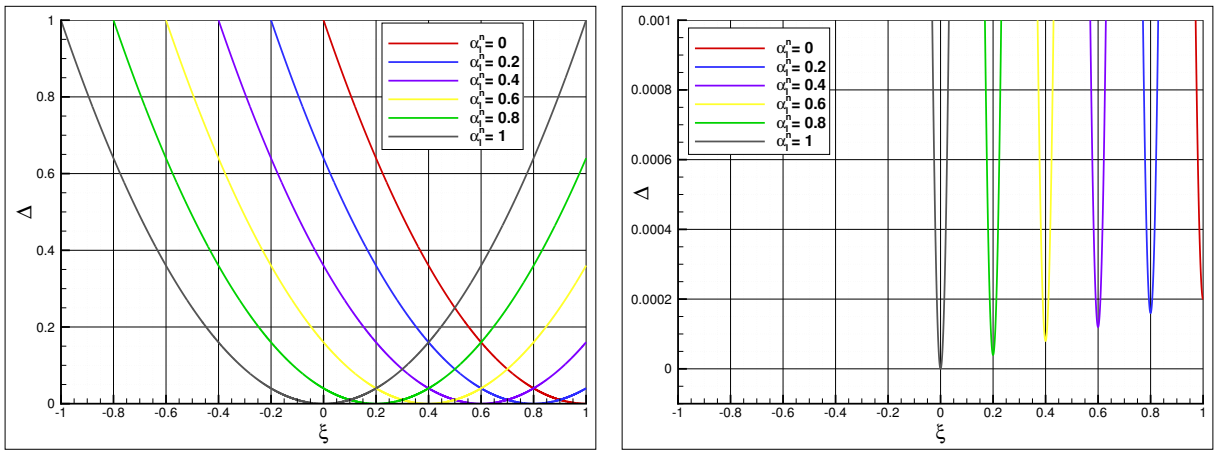


FIGURE 10.8 – ***Discriminant Δ de l'équation du second degré (10.58) en fonction de ξ et de α_l^n. Mélange diphasique air-eau.***

Par conséquent, ***la racine qui nous intéresse est toujours la racine*** X_1 puisque c'est celle qui donne des valeurs positives ou nulles. C'est donc cette racine que nous allons tracer. La Figure 10.9 représente d'abord une vue globale pour ξ variant entre -1 et 1. La zone d'atomisation primaire est caractérisée par des valeurs de $\xi < 0$. On observe logiquement une diminution de pression dans cette zone ($X_1 < 1$), qui s'explique par la diminution de la masse volumique du fluide engendrée par le transfert de masse du fluide vers la phase dispersée. À l'inverse, la zone de pseudo-coalescence correspond aux valeurs de $\xi > 0$. On observe dans cette zone une augmentation de pression ($X_1 > 1$), due à l'augmentation de la masse volumique du fluide consécutive au transfert de masse de la phase dispersée vers le fluide.

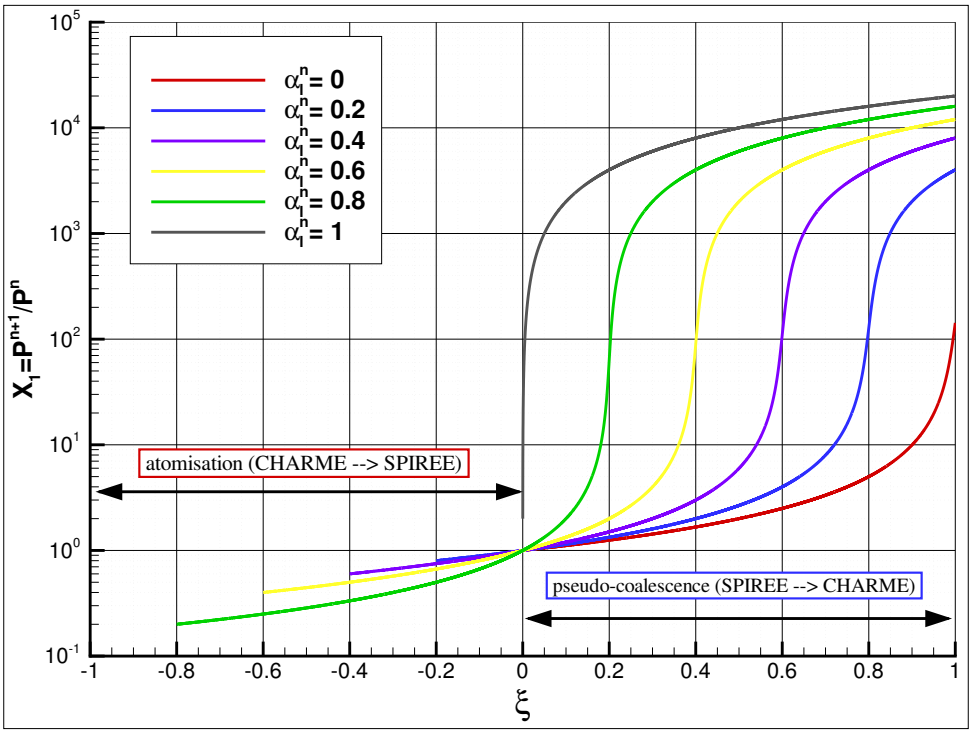


FIGURE 10.9 – ***Rapport P^{n+1}/P^n en fonction de α_l^n et de ξ. Mélange diphasique air-eau.***

La Figure 10.10 se concentre sur le cas de l'atomisation primaire ($\xi < 0$), la Figure 10.11 sur celui de la pseudo-coalescence ($\xi > 0$). Ces deux figures ne représentent pas directement la racine X_1 mais respectivement $1 - X_1$ et

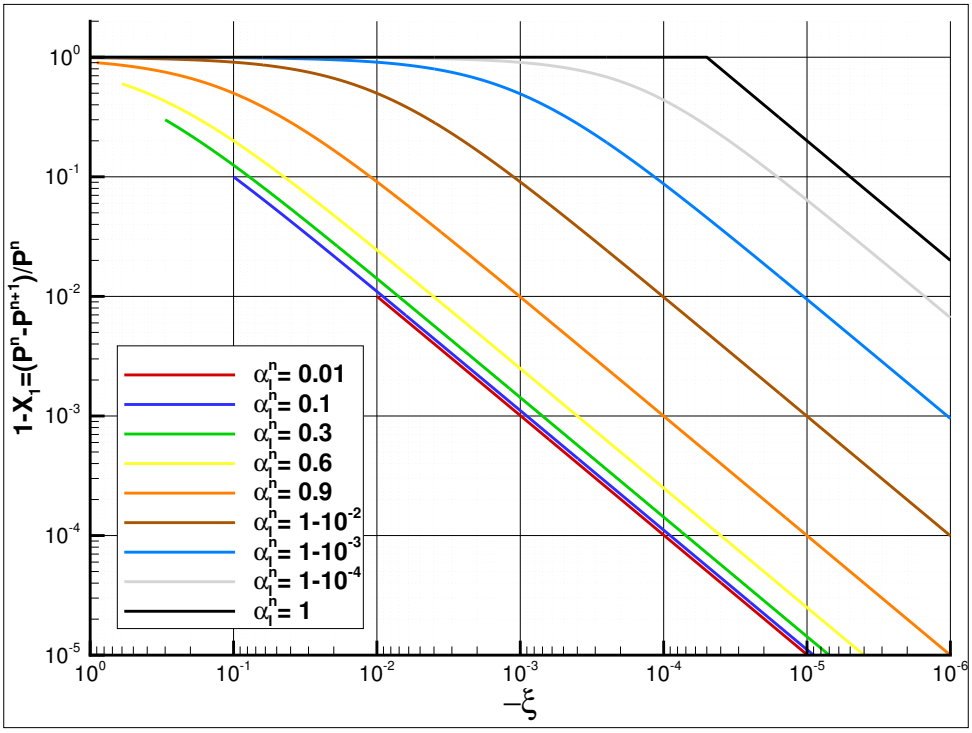


FIGURE 10.10 – ***Variation relative de pression*** $(P^n - P^{n+1})/P^n$ ***en fonction de*** α_l^n ***et de*** $\xi < 0$ ***(atomisation primaire). Mélange diphasique air-eau.***

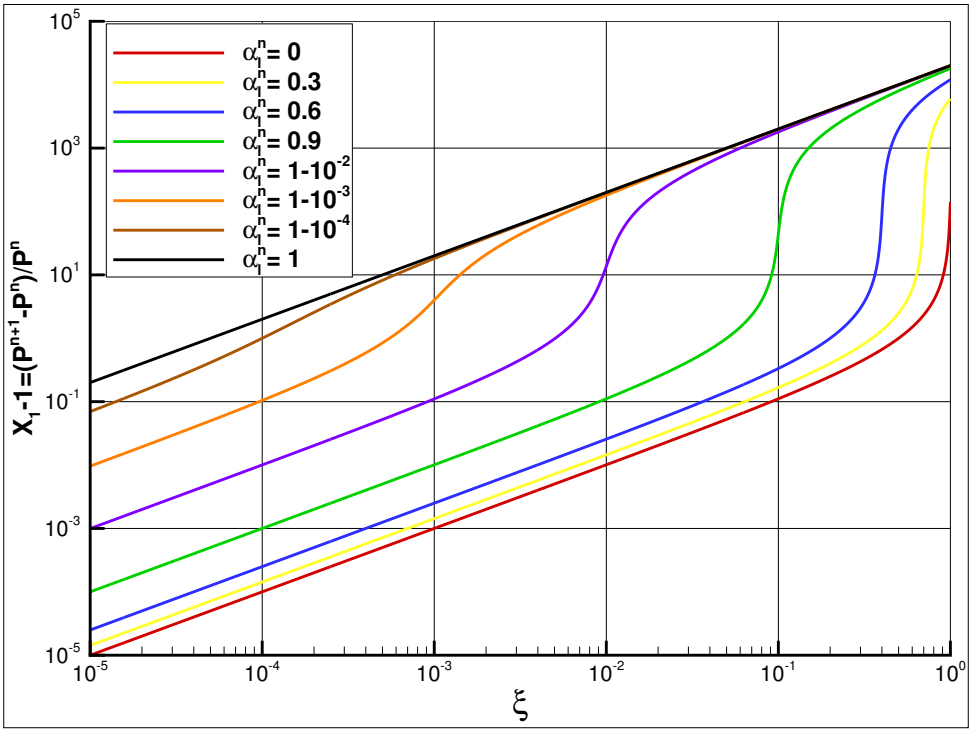


FIGURE 10.11 – ***Variation relative de pression*** $(P^{n+1} - P^n)/P^n$ ***en fonction de*** α_l^n ***et de*** $\xi > 0$ ***(pseudo-coalescence). Mélange diphasique air-eau.***

$X_1 - 1$, c'est-à-dire la variation de pression relative $(P^{n+1} - P^n)/P^n$ et son opposée $(P^n - P^{n+1})/P^n$. De plus, l'emploi de doubles échelles logarithmiques pour ces deux figures permet de visualiser plus précisément l'importance de la variation de pression pour de ***faibles valeurs de*** ξ. Celles-ci sont en effet plus représentatives des conditions réelles de calcul, puisque l'on s'attache à effectuer les transferts de manière la plus progressive possible.

Mélange diphasique hydrogène-oxygène

Les données thermodynamiques retenues pour le mélange hydrogène-oxygène, déjà utilisées au Chapitre 5 et en Annexe D, sont les suivantes (unités S.I.) :

$$\begin{cases} \beta_0 &= 1.71 \times 10^{-9} \\ P^n &= 10^6 \\ \rho_l^n &= 1.168 \times 10^3 \end{cases} . \tag{10.68}$$

Comme dans le cas précédent, il faut d'abord s'assurer que l'équation du second degré (10.58) admet des solutions réelles. D'après la Figure 10.12, qui représente le discriminant Δ en fonction de ξ et de α_l^n, on peut tirer exactement les mêmes conclusions que dans le cas du mélange air-eau [6]. Ainsi, ***la racine qui nous intéresse est toujours la racine*** X_1, et c'est donc celle que nous allons tracer pour différentes valeurs de α_l^n comprises entre 0 et 1 et avec ξ variant entre $-\alpha_l^n$ et 1.

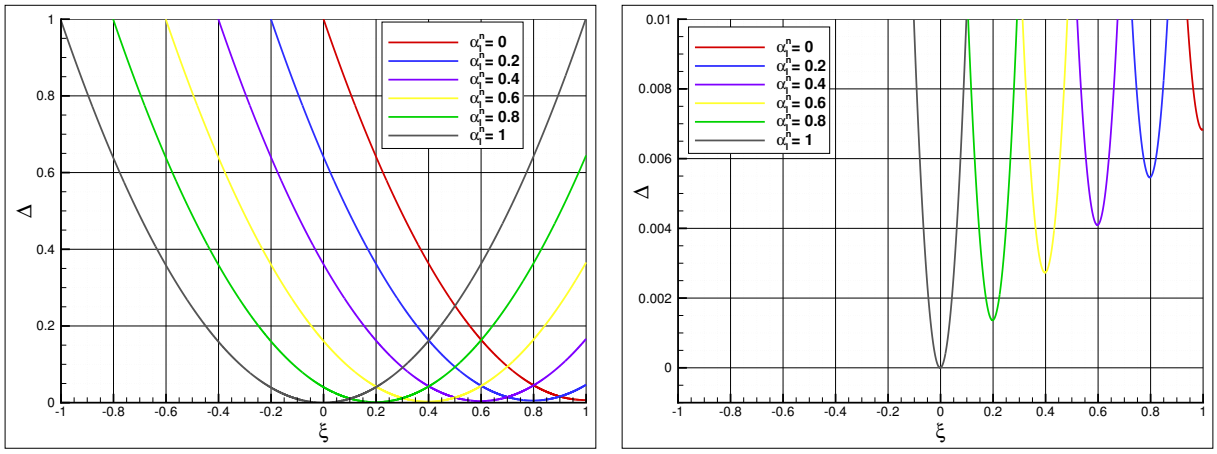


FIGURE 10.12 – ***Discriminant*** Δ ***de l'équation du second degré*** (10.58) ***en fonction de*** ξ ***et de*** α_l^n***. Mélange diphasique hydrogène-oxygène.***

La Figure 10.13 représente une vue globale pour ξ variant entre -1 et 1, la zone d'atomisation primaire étant toujours caractérisée par des valeurs de $\xi < 0$, et la zone de pseudo-coalescence par des des valeurs de $\xi > 0$. Comme dans le cas du mélange air-eau, on observe une diminution de pression dans le cas de l'atomisation primaire et une augmentation de pression dans le cas de la pseudo-coalescence. Les Figure 10.14 et Figure 10.15 se concentrent respectivement sur les zones d'atomisation primaire ($\xi < 0$) et de pseudo-coalescence ($\xi > 0$). Elles sont très similaires aux figures équivalentes obtenues dans le cas du mélange air-eau. Plus précisément, on observe des différences significatives seulement pour des valeurs de α_l^n tendant vers 1, là où la plus grande compressibilité de l'oxygène liquide se fait ressentir. C'est également ce que révèle le Tableau 10.1, où ont été reportées certaines valeurs particulières de la variation relative de pression.

Quelle que soit la nature du mélange diphasique, l'interprétation est finalement la même. Si l'on veut garantir des variations de pression négligeables au moment des transferts liquide-liquide entre solveurs, il est primordial que les conditions suivantes soient réunies :

- la valeur absolue de ξ, la fraction volumique de liquide transférée d'un solveur à l'autre, doit être la plus faible possible.
- la fraction volumique α_l^n de la phase liquide dans CHARME doit également être la plus faible possible.

Évidemment, la pseudo-coalescence présente un caractère plus "risqué" que l'atomisation primaire puisque le sens physique du modèle est en contradiction avec la seconde condition. Les figures tracées pour $\xi > 0$ montrent ainsi que la variation de pression relative augmente de plusieurs ordres de grandeur lorsque les fractions volumiques ξ et α_l^n tendent vers 1.

6. On notera simplement que lorsque $\alpha_l^n = 1$, la valeur de ξ pour laquelle $\Delta = 0$ et donc le polyôme admet une racine double $X_1 = X_2 = 0$, est $\xi_0 = -\beta_0 P^n = -1.71 \times 10^{-3}$.

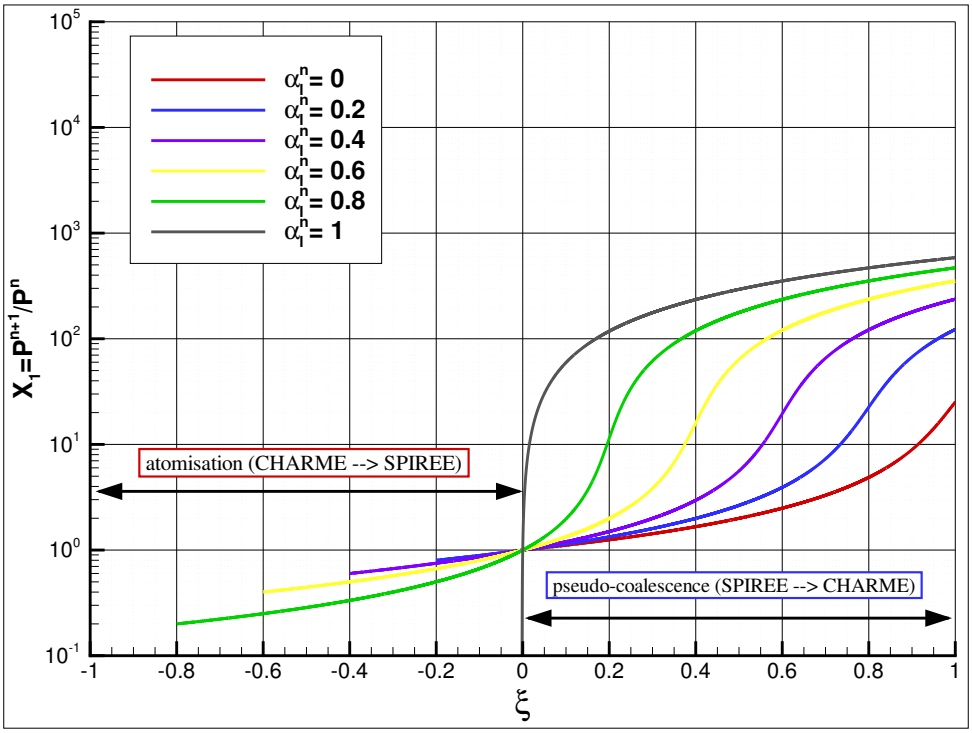


FIGURE 10.13 – ***Rapport P^{n+1}/P^n en fonction de α_l^n et de ξ. Mélange diphasique hydrogène-oxygène.***

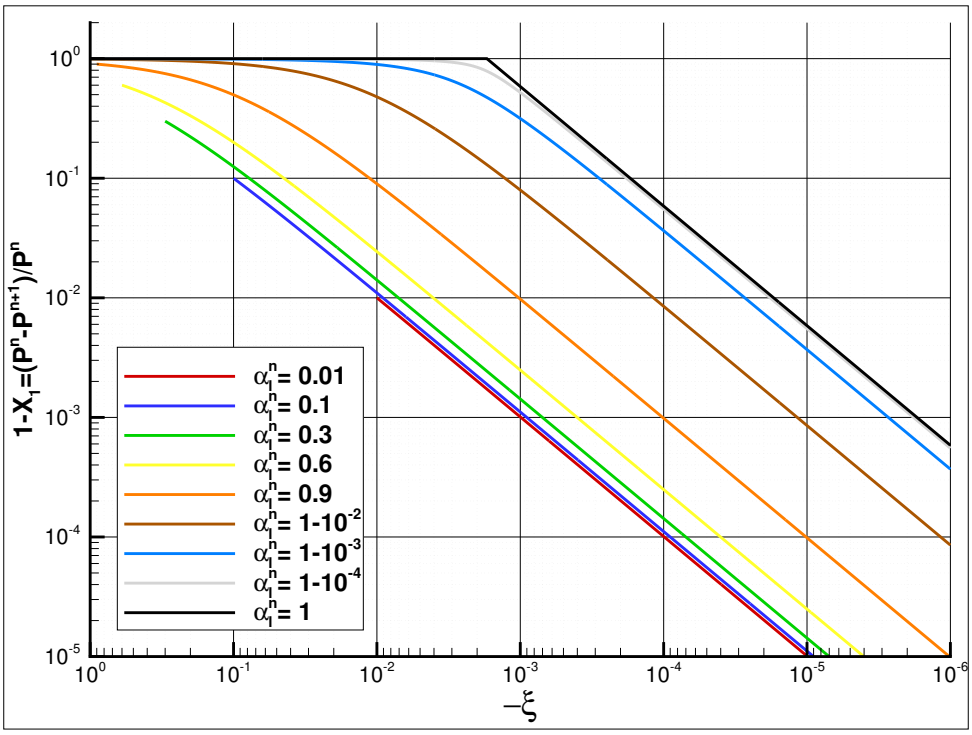


FIGURE 10.14 – ***Variation relative de pression $(P^n - P^{n+1})/P^n$ en fonction de α_l^n et de $\xi < 0$ (atomisation primaire). Mélange diphasique hydrogène-oxygène.***

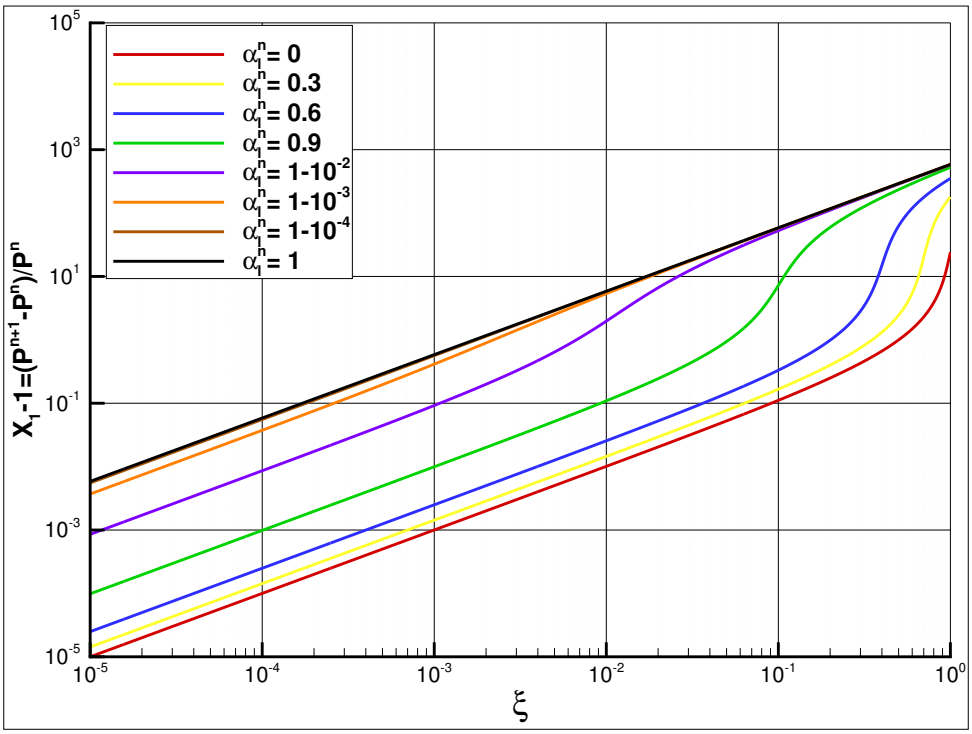


FIGURE 10.15 – ***Variation relative de pression*** $(P^{n+1} - P^n)/P^n$ ***en fonction de*** α_l^n ***et de*** $\xi > 0$ ***(pseudo-coalescence). Mélange diphasique hydrogène-oxygène.***

	ATOMISATION PRIMAIRE $(1-P^{n+1}/P^n)$				PSEUDO-COALESCENCE (P^{n+1}/P^n-1)			
ξ	-10^{-1}	-10^{-2}	-10^{-3}	-10^{-4}	10^{-4}	10^{-3}	10^{-2}	10^{-1}
α_l^n	0.99	0.9	0.6	10^{-2}	0	0.6	0.9	0.99
air-eau	90%	9%	0.25%	0.01%	0.01%	0.25%	11.1%	180000%
H_2-O_2	90%	9%	0.25%	0.01%	0.01%	0.25%	10.9%	5200%

TABLEAU 10.1 – ***Variation de pression relative pour quelques valeurs particulières de*** (ξ, α_l^n)***. Mélange air-eau et hydrogène-oxygène.***

10.5 Validation élémentaire du modèle sur une configuration simplifiée

En conclusion de ce chapitre, nous allons appliquer le modèle de couplage liquide-liquide à une configuration simplifiée et bi-dimensionnelle du banc Mascotte. L'objectif est de réaliser une validation élémentaire et essentiellement qualitative du modèle. Des comparaisons avec l'expérience feront l'objet du Chapitre 11, le cas de calcul considéré ici ne correspondant à aucun essai réel sur le banc Mascotte. Il s'agit en effet de se placer dans les conditions du point de fonctionnement A-10 (cf. Chapitre 1), mais sans prendre en compte l'évaporation de la phase dispersée et la combustion. L'attention est donc portée sur la description des transferts entre solveurs pour l'atomisation primaire et la pseudo-coalescence. Nous souhaitons en particulier évaluer les trois points suivants :

- le modèle de couplage a-t-il un impact significatif sur la dynamique du jet liquide dense ? Il ne faudrait pas, par exemple, que le transfert entre solveurs empêche la formation d'un dard liquide en agissant de manière trop abrupte.
- observe-t-on, en pratique, des variations de pression significatives provoquées par le transfert ? L'analyse théorique de ces variations de pression a été menée dans le paragraphe précédent, il s'agit maintenant d'en évaluer concrètement l'importance.
- comment se comporte le terme de pseudo-coalescence ? Nous souhaitons en particulier vérifier qu'il n'annule pas l'effet du terme d'atomisation primaire. Par ailleurs, sur ce cas où le maillage utilisé va s'avérer extrêmement résolu, il va être intéressant d'observer si ce terme prévient effectivement l'apparition d'accumulations locales de particules.

Pour cela, nous allons comparer les résultats de trois simulations menées sur cette configuration simplifiée :

1. la simulation ***S1*** est réalisée uniquement avec le solveur CHARME, elle n'intègre aucun couplage avec un solveur dédié à la phase dispersée. Pour que les conditions d'injection de l'oxygène liquide et de l'hydrogène soient représentatives du cas réel 3D, notamment en ce qui concerne les flux de quantité de mouvement, ce sont les débits surfaciques qui sont spécifiés et non les débits massiques. La mise en données complète de CEDRE pour cette simulation est présentée dans le Tableau 10.2. A noter que la température d'injection de l'oxygène liquide est fixée à 280 K, c'est-à-dire la même que celle de la phase gazeuse. Cependant, les données thermophysiques de l'oxygène liquide sont définies de manière à correspondre à une température de 85 K. Cette manière de procéder, qui sera reprise lors de la simulation finale du Chapitre 11, a été expliquée en détail au Chapitre 5 et en Annexe D. Elle est nécessaire pour éviter la survenue d'oscillations de pression inhérentes au formalisme 4 équations.
2. la simulation ***S2*** inclut les solveurs CHARME (avec la mise en données de la simulation ***S1***) et SPIREE. Elle met en œuvre le modèle de transfert liquide-liquide complet. La phase dispersée est décrite en suivant l'approche sectionnelle (cf. Chapitre 6) et les termes d'atomisation primaire et de pseudo-coalescence sont activés. Les termes sources de fragmentation secondaire sont pris en compte, de même que la force de traînée. En revanche, l'évaporation n'est pas prise en compte. La mise en données complète est présentée dans le Tableau 10.3.
3. la simulation ***S3*** inclut également les solveurs CHARME et SPIREE, mais cette fois la phase dispersée est décrite suivant l'approche multi-classe avec une seule classe de gouttes [7], tandis que la fragmentation secondaire et la pseudo-coalescence ne sont pas prises en compte (voir le Tableau 10.4). Le couplage liquide-liquide ne se fait donc que dans un sens, du solveur CHARME vers le solveur SPIREE.

Géométrie et maillage

Les simulations sont réalisées sur une configuration 2D représentative de la géométrie 3D réelle du banc Mascotte, présentée au Chapitre 1. Le plan de calcul constitue une coupe verticale longitudinale passant par le centre de la géométrie. Ainsi, les films d'hélium injectés le long des parois latérales ne sont pas pris en compte ici. La géométrie et le maillage sont représentés sur la Figure 10.16, les caractéristiques de l'injecteur ayant été précisées au Chapitre 1 (cf. Figure 1.9).

Le maillage est non structuré et constitué d'environ 1,6 million d'éléments triangulaires. Il est découpé en 256 sous-domaines permettant le calcul sur autant de processeurs. La taille des éléments est fortement hétérogène de manière à pouvoir mailler plus finement la zone d'atomisation primaire, située immédiatement en aval de l'injecteur. Dans cette zone, le diamètre minimal des cellules vaut 3,39 µm (une quarantaine de mailles sont situées dans l'épaisseur de la lèvre de l'injecteur d'oxygène), tandis que le diamètre maximal des cellules dans le fond de la chambre vaut environ 6 mm.

7. Il s'agit donc du modèle appelé ***bi-fluide*** dans la revue bibliographique du Chapitre 3.

SOLVEURS	CHARME seul (aucun couplage)
FLUIDE CHARME	Phase gazeuse : (H_2, N_2) Phase liquide : $O_{2(l)}$
MODÈLES PHYSIQUES	• Navier-Stokes sans modèle de turbulence • ***Non réactif***
DISCRÉTISATION SPATIALE	• Méthode MUSCL multipente (cf. Chapitre 9) • Schéma HLLC bas-Mach (cf. Chapitre 8)
INTÉGRATION TEMPORELLE	• Schéma explicite RK3 • Δt piloté par un critère CFL ($CFL_{max} = 0{,}65$) • Temps physique total calculé : 5 ms
INITIALISATION	• $Y_{O_{2(l)}} = 1$ dans l'injecteur LOx, $Y_{N_2} = 1$ ailleurs • $P = 10$ bar • $T = 280$ K ($T \equiv 85$ K pour $O_{2(l)}$, cf. Annexe D) • $\boldsymbol{u} = (0, 0)$: fluide au repos
CONDITIONS AUX LIMITES	• 2 entrées subsoniques : $\left\{ \begin{array}{lcl} T & = & 280 \text{ K} \\ V_{inj} & = & 276 \text{ m/s} \\ Y_{H_2} & = & 1 \end{array} \right.$, $\left\{ \begin{array}{lcl} T & = & 280 \text{ K} \\ V_{inj} & = & 4{,}2 \text{ m/s} \\ Y_{O_{2(l)}} & = & 1 \end{array} \right.$ • 1 sortie supersonique (après amorçage de la tuyère) • Parois

TABLEAU 10.2 – ***Mise en données de la simulation S1.***

SOLVEURS	CHARME (idem ***S1***) + SPIREE
MODÈLES PHYSIQUES SPIREE	• Méthode sectionnelle (cf. Chapitre 3, Chapitre 6) avec 3 sections (bornes en µm) : $I_s^{(1)} = [0, 100[$, $I_s^{(2)} = [100, 200[$, $I_s^{(3)} = [200, +\infty[$ • Termes sources de trainée (cf. Chapitre 7), ***pas d'évaporation*** • Fragmentation secondaire (cf. Chapitre 7) • Atomisation primaire ***et*** pseudo-coalescence
DISCRÉTISATION SPATIALE SPIREE	• Méthode MUSCL multipente (cf. Chapitre 9) • Schéma de Godunov (cf. Chapitre 8)
INTÉGRATION TEMPORELLE	• Splitting de Lie • Schéma explicite RK2 pour le transport SPIREE • Schéma d'Euler explicite pour les termes sources de couplage • Δt piloté par CHARME
INITIALISATION SPIREE	Vide de particules
CONDITIONS AUX LIMITES SPIREE	1 sortie + parois (pas d'injection)

TABLEAU 10.3 – ***Mise en données de la simulation S2.***

On peut donc qualifier le maillage utilisé ici de ***quasi-DNS*** [8] dans la zone d'atomisation primaire. L'intérêt

8. Une estimation approximative de l'échelle de Kolmogorov (cf. relation (5.53)) à partir des données d'injection (cf. Tableau 1.2) conduit à une valeur de l'ordre du micromètre.

SOLVEURS	CHARME + SPIREE
MODÈLES PHYSIQUES SPIREE	• Méthode multi-classe avec 1 classe (ou "bi-fluide", cf. Chapitre 3) • Pas de fragmentation secondaire • Atomisation primaire ***mais pas de pseudo-coalescence***
INTÉGRATION TEMPORELLE	Intégration globale

TABLEAU 10.4 – ***Mise en données de la simulation S3.***

d'un tel raffinement du maillage est double. D'une part, il va être intéressant d'observer l'effet d'un maillage aussi fin sur la présence de δ-chocs et d'accumulations de particules, ainsi que la capacité éventuelle du modèle de pseudo-coalescence à réduire les problèmes causés par ces δ-chocs. D'autre part, il s'agit également d'apporter un complément à la simulation 3D du Chapitre 11 qui, pour des raisons évidentes de coût de calcul, ne pourra pas être réalisée avec un maillage aussi fin [9]. Cela ne constitue cependant pas encore une étude de convergence en maillage, qu'il conviendrait de réaliser ultérieurement.

Méthodologie d'évaluation de la longueur de dard liquide

Afin d'évaluer la longueur de dard liquide à partir des résultats issus des simulations, nous proposons la méthodologie suivante. Avec un logiciel de post-traitement adapté, il est possible d'isoler la zone définissant le dard liquide en procédant à un masquage du champ de fraction volumique de liquide dans CHARME (voir l'illustration de la Figure 10.17)). On isole ainsi les cellules du maillage qui respectent les deux conditions suivantes :

1. $\alpha_l > \alpha_{seuil}$. La fraction volumique de la phase liquide doit être supérieure à une valeur seuil à fixer, mais qui doit évidemment être proche de 1 [10]. En l'occurrence, nous choisissons ici la valeur de $\alpha_{seuil} = 1$.
2. $x > x_{inj}$, où $x_{inj} = 10$ mm définit la position axiale de la sortie de l'injecteur d'oxygène. Il s'agit d'exclure du calcul l'oxygène qui se trouve dans l'injecteur.

Ce faisant, il est possible de calculer assez simplement la surface qui reste visible et son évolution au cours du temps. Pour obtenir une longueur équivalente de dard liquide, il reste à supposer que la surface délimitée par le masquage peut se ramener à un triangle tel que représenté sur la Figure 10.17. La longueur L du dard liquide s'exprime alors en fonction de la surface $\mathcal{S}$ et du diamètre de l'injecteur, dont on connait par ailleurs la valeur ($D = 5$ mm, voir la Figure 1.9 au Chapitre 1). On a en effet la relation suivante :

$$L = \frac{2\mathcal{S}}{D} . \tag{10.69}$$

Comparaison et analyse des résultats

Nous allons maintenant comparer et analyser les résultats des trois simulations ***S1***, ***S2*** et ***S3***. Les résultats les plus pertinents ont été reportés sur les figures des pages suivantes, permettant de tirer les conclusions ci-dessous :

– le modèle de couplage entre solveurs ne dénature manifestement pas la dynamique du cœur liquide dense (cf. Figure 10.18, Figure 10.19 et Figure 10.20). Même s'il aurait été intéressant de poursuivre encore les simulations pour s'en assurer, il semble que la longueur de dard liquide tende à se stabiliser, aussi bien pour la simulation ***S1*** (sans couplage) que pour la simulation ***S2*** (avec couplage), vers une valeur située entre 10 et 15 mm. Cette valeur est légèrement inférieure lorsque le couplage est activé, néanmoins elle reste très proche de celle observée sans couplage. La simulation complète réalisée au Chapitre 11, sur une configuration 3D et pour un temps physique plus important, permettra de vérifier que la longueur de dard liquide atteint effectivement une valeur stationnaire.

– l'intérêt du modèle de transfert liquide-liquide inverse, par pseudo-coalescence, est illustré par la Figure 10.22 et la Figure 10.23. Il apparait en effet que sur ce maillage extrêmement fin, la très bonne résolution de la turbulence de la phase gazeuse occasionne un grand nombre de croisements de trajectoires pour les particules de la phase dispersée. Il en résulte l'apparition de δ-chocs inhérents au modèle eulérien utilisé (cf. Chapitre 3),

9. Le diamètre minimal des mailles dans la zone d'atomisation primaire sera de l'ordre de 50 µm, correspondant à un maillage d'environ 10 millions d'éléments au total.

10. Il s'avère que la valeur de ce seuil peut avoir une influence non négligeable sur la longueur calculée si le maillage est relativement grossier. Dans ce cas, il faut être vigilant à la marge d'erreur possible liée à la définition du seuil.

et donc de zones d'accumulations locales de particules, où la fraction volumique de la phase dispersée devient très importante, voire même supérieure à 1. C'est ce que montrent les résultats de la Figure 10.22 et de la Figure 10.23 pour la simulation ***S3***, qui n'intègre pas de transfert inverse par pseudo-coalescence. Ces taux de chargement localement très importants sont évidemment non physiques, et de surcroît ils finissent ici par entraîner l'arrêt prématuré de la simulation ***S3*** à l'instant $t = 0.0013$ s. Ce comportement n'est pas reproduit par la simulation ***S2***, dans laquelle la valeur maximale de la fraction volumique totale ne dépasse globalement pas 2% grâce au terme de pseudo-coalescence.

– la stratégie de couplage ne semble pas impliquer localement de variations de pression significatives, telles que celles analysées au paragraphe § 10.4. D'après la Figure 10.21, les évolutions de la pression maximale dans CHARME au cours des simulations ***S1***, ***S2*** et ***S3*** (avant l'arrêt du calcul) sont globalement équivalentes. L'évolution de la pression moyenne est identique pour les simulations ***S2*** et ***S3*** (jusqu'à l'arrêt du calcul), mais diffère légèrement de ce que l'on observe pour la simulation ***S1***. Dans les trois cas, on observe une diminution de la pression moyenne. C'est un résultat logique : la pression initiale de 10 bar correspond à la pression nominale de la configuration réactive. Ici, en l'absence de combustion, la pression diminue. Il est également logique qu'elle diminue de manière plus importante lorsque le couplage entre solveurs est activé. En effet, l'évaporation n'étant pas prise en compte ici, le couplage entre CHARME et SPIREE implique globalement un déficit de masse pour CHARME en comparaison du cas sans couplage, puisque le transfert liquide-liquide est évidemment plus important dans le sens de l'atomisation primaire que dans celui de la pseudo-coalescence. De ce déficit de masse, il résulte logiquement une baisse de pression plus importante. Cela étant, cette diminution de pression serait annulée si l'évaporation était prise en compte et qu'un transfert de masse vers la phase gazeuse du fluide CHARME avait lieu.

  Par ailleurs, il est à noter que l'allure des signaux de pression maximale aux premiers instants des simulations est due à une initialisation trop brutale des trois simulations. Le débit nominal d'hydrogène a été imposé dès le départ, ce qui revient à injecter un gaz à une vitesse d'environ 300 m/s dans un environnement au repos. Ceci génère inévitablement une onde de pression initiale très importante, dont on observe manifestement l'effet tout au long du calcul étant donné le caractère oscillatoire des signaux de pression. Cela n'enlève rien aux enseignements que l'on souhaitait retirer de ces simulations, néanmoins cela met en évidence qu'il faudra procéder de manière plus progressive lors de la simulation complète du Chapitre 11.

En plus de ces conclusions tirées de la comparaison des trois simulations, certains résultats qualitatifs de la simulation ***S2*** sont également intéressants. Il s'agit en effet de la simulation qui s'approche le plus de la stratégie complète qui a été détaillée dans la Partie II et que nous mettrons en œuvre au Chapitre 11. Nous avons ainsi représenté sur la Figure 10.24 les champs de vitesse et de vorticité du fluide (solveur CHARME). L'utilisation d'échelles logarithmiques est intéressante étant donné que plusieurs ordres de grandeurs séparent les valeurs minimales et maximales de la vitesse et de la vorticité. En outre, deux isocontours de la fraction volumique de liquide dans CHARME ont été ajoutés sur ces champs. Ils permettent de visualiser la position du cœur liquide dense ($\alpha_l = 0.999$), et la limite approximative de la zone de mélange diphasique ($\alpha_l = 0.001$). Entre ces deux isocontours, il existe en effet une importante zone où les phases liquide et gazeuse sont mélangées à l'échelle de sous-maille, sans que cela ne résulte uniquement de la diffusion numérique étant donné l'extrême raffinement du maillage. Dans cette vaste région de l'écoulement, il est fort probable qu'un modèle à 7 équations montrerait son avantage en permettant de décrire les deux phases sans avoir recours à l'hypothèse d'homogénéité locale.

Par ailleurs, la Figure 10.25 représente un champ instantané du terme source de transfert liquide-liquide complet comparé à un champ de fraction volumique totale de la phase dispersée, toujours sur la simulation ***S2***. Le terme de transfert $S^l_M = S^l_{M_C} - S^l_{M_A}$ indique le flux net entre la pseudo-coalescence et l'atomisation primaire. Les zones colorées en bleu correspondent à un transfert par atomisation primaire, de CHARME vers SPIREE, tandis que les zones en rouge représentent le transfert inverse par pseudo-coalescence, de SPIREE vers CHARME. Assez logiquement, le transfert par atomisation primaire est prépondérant, puisque la fraction volumique de la phase dispersée dans SPIREE ne résulte que de ce transfert (pas d'initialisation de particules ni d'injection via les conditions aux limites). Enfin, les Figure 10.26, Figure 10.27 et Figure 10.28 permettent de visualiser l'évolution temporelle simultanée de la fraction volumique de liquide dans CHARME et de la fraction volumique de chacune des trois sections de la phase dispersée. La troisième section est alimentée uniquement par le terme source d'atomisation primaire, et alimente ensuite les deux autres sections sous l'effet de la fragmentation secondaire.

L'ensemble de ces résultats a donc permis une première validation élémentaire du modèle de couplage liquide-liquide entre les solveurs CHARME et SPIREE. L'étape suivante, objet du Chapitre 11, consiste à mettre en œuvre la stratégie complète, présentée dans la Partie II, pour réaliser la simulation 3D du banc Mascotte en configuration réactive.

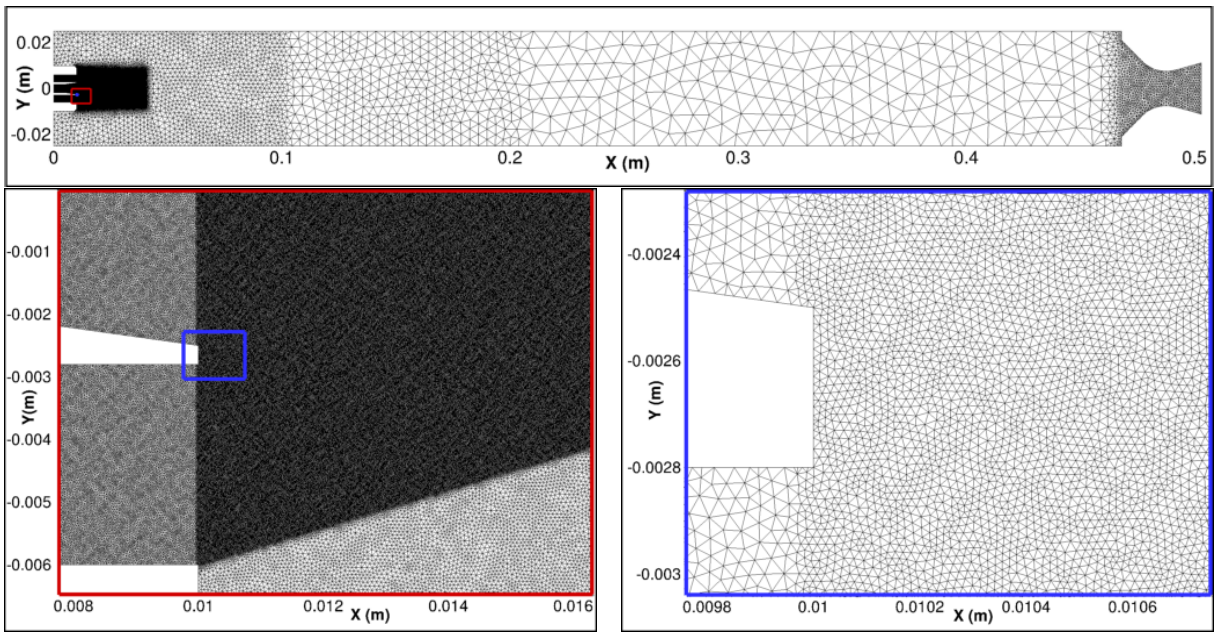


FIGURE 10.16 – *Géométrie 2D du banc Mascotte et maillage non structuré utilisé.*

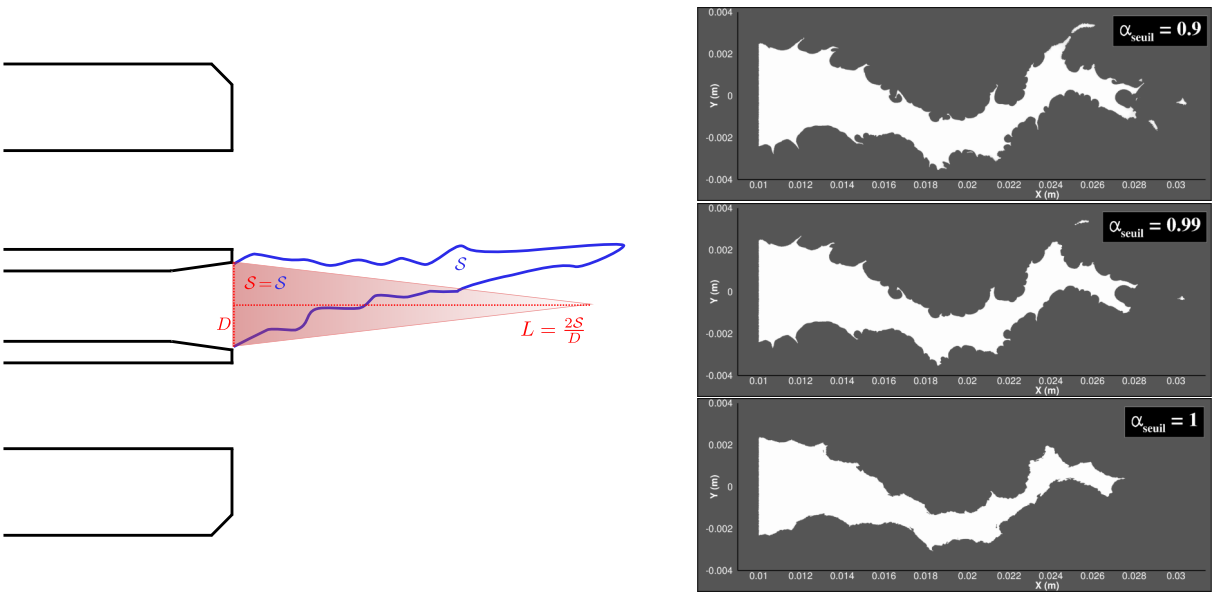


FIGURE 10.17 – *Méthodologie d'estimation de la longueur de dard liquide : masquage du champ de fraction volumique de la phase liquide dans CHARME et calcul de la surface résultante.*

FIGURE 10.18 – *Champs instantanés de la fraction volumique de liquide dans CHARME, pour* $t = 0$, $t = 0.001$ *et* $t = 0.002$ *secondes. Comparaison des simulations S1 et S2 (sans et avec couplage).*

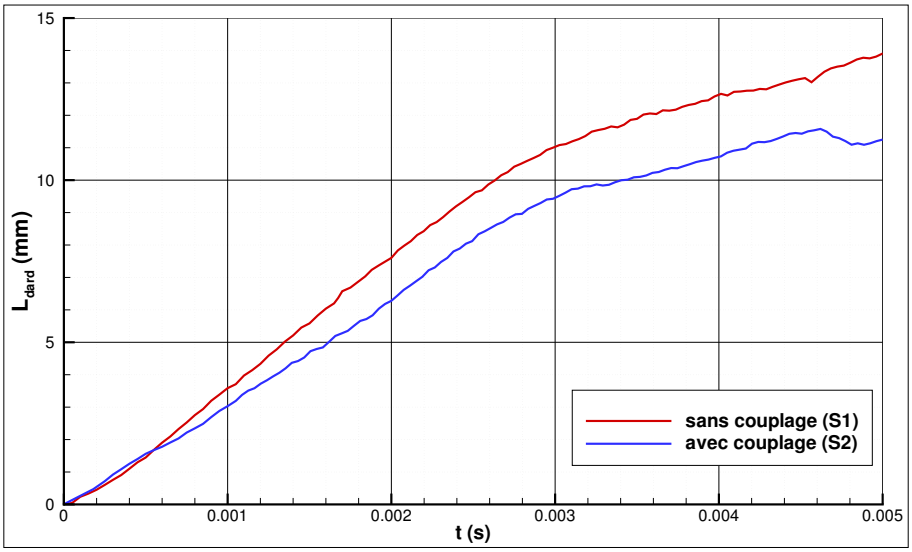


FIGURE 10.19 – *Évolution temporelle de la longueur de dard liquide (critère* $\alpha_{seuil} = 1$*). Comparaison des simulations S1 et S2 (sans et avec couplage).*

FIGURE 10.20 – *Champs instantanés de la fraction volumique de liquide dans CHARME, pour* $t = 0.003$*,* $t = 0.004$ *et* $t = 0.005$ *secondes. Comparaison des simulations S1 et S2 (sans et avec couplage).*

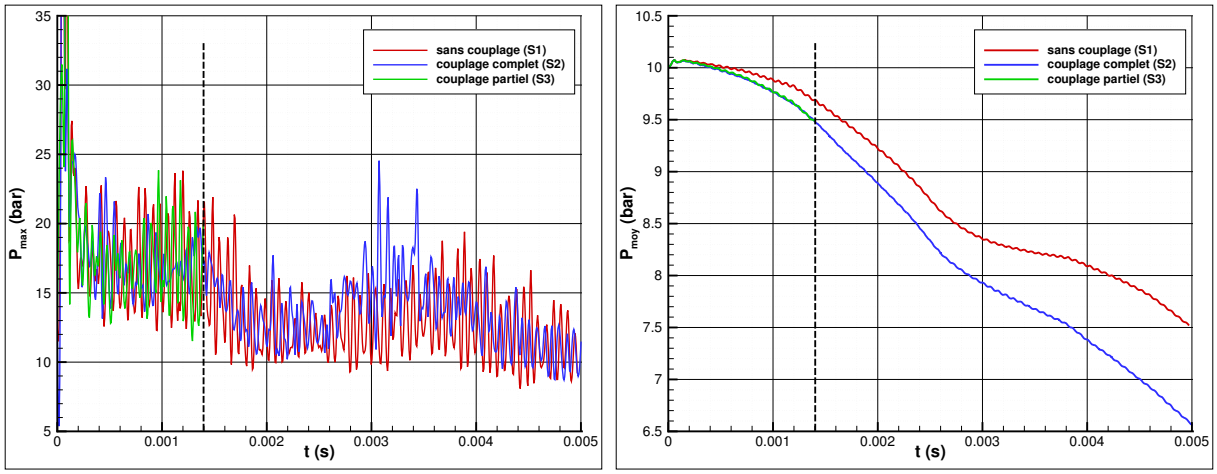


FIGURE 10.21 – *Évolution temporelle de la pression maximale (gauche) et moyenne (droite). Comparaison des simulations S1, S2 et S3.*

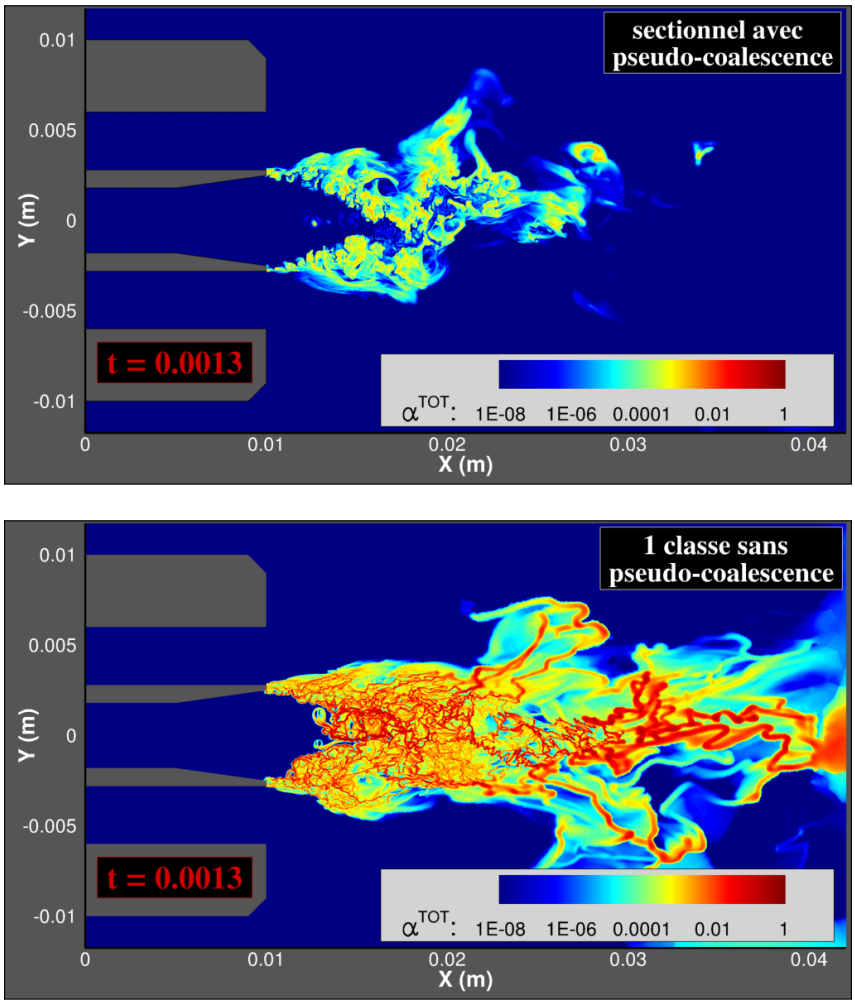


FIGURE 10.22 – *Champs instantanés à $t = 0.0013$ s de la fraction volumique totale de la phase dispersée. Comparaison des simulations S2 et S3 (avec ou sans modèle de pseudo-coalescence).*

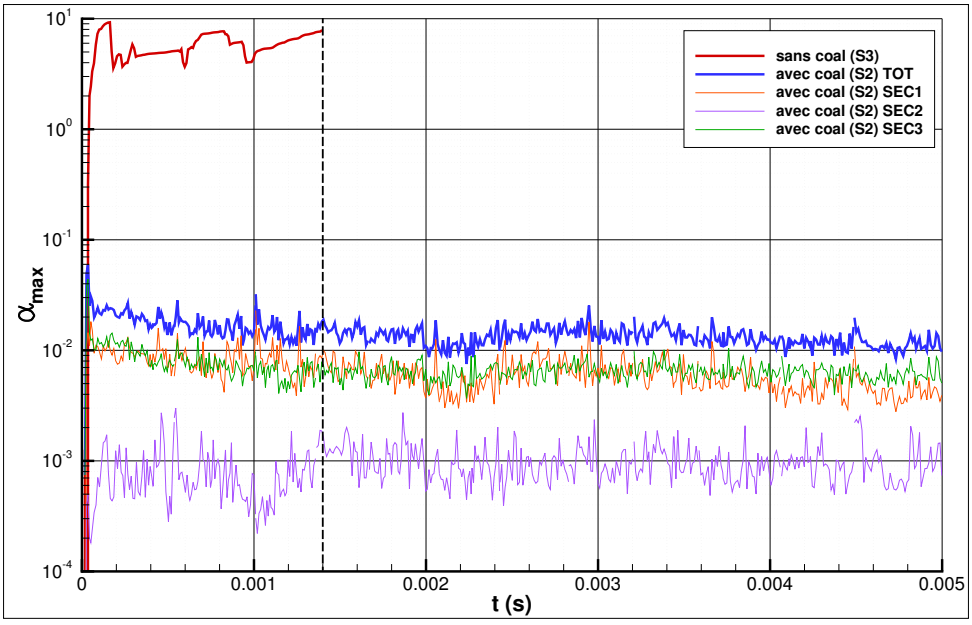


FIGURE 10.23 – *Évolution temporelle du maximum de fraction volumique de la phase dispersée. Comparaison des simulations S2 (valeur totale et par section) et S3 (valeur totale).*

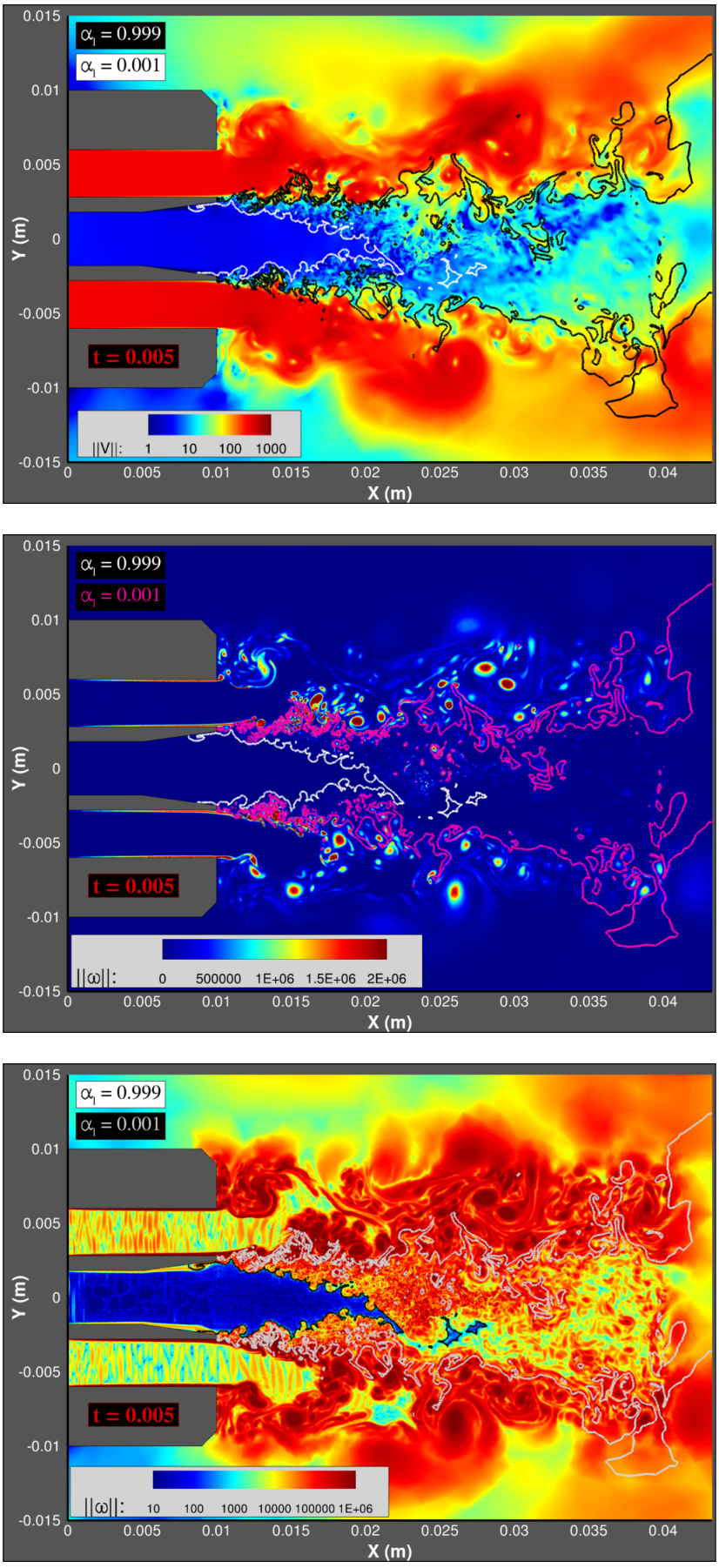


FIGURE 10.24 – *Champs instantanés de la vitesse du fluide CHARME en échelle logarithmique (haut), et de la vorticité en échelle linéaire (milieu) et logarithmique (bas). En superposition : deux isocontours de fraction volumique de la phase liquide dans CHARME. Simulation S2 à l'instant final* $t = 0.005$ *s.*

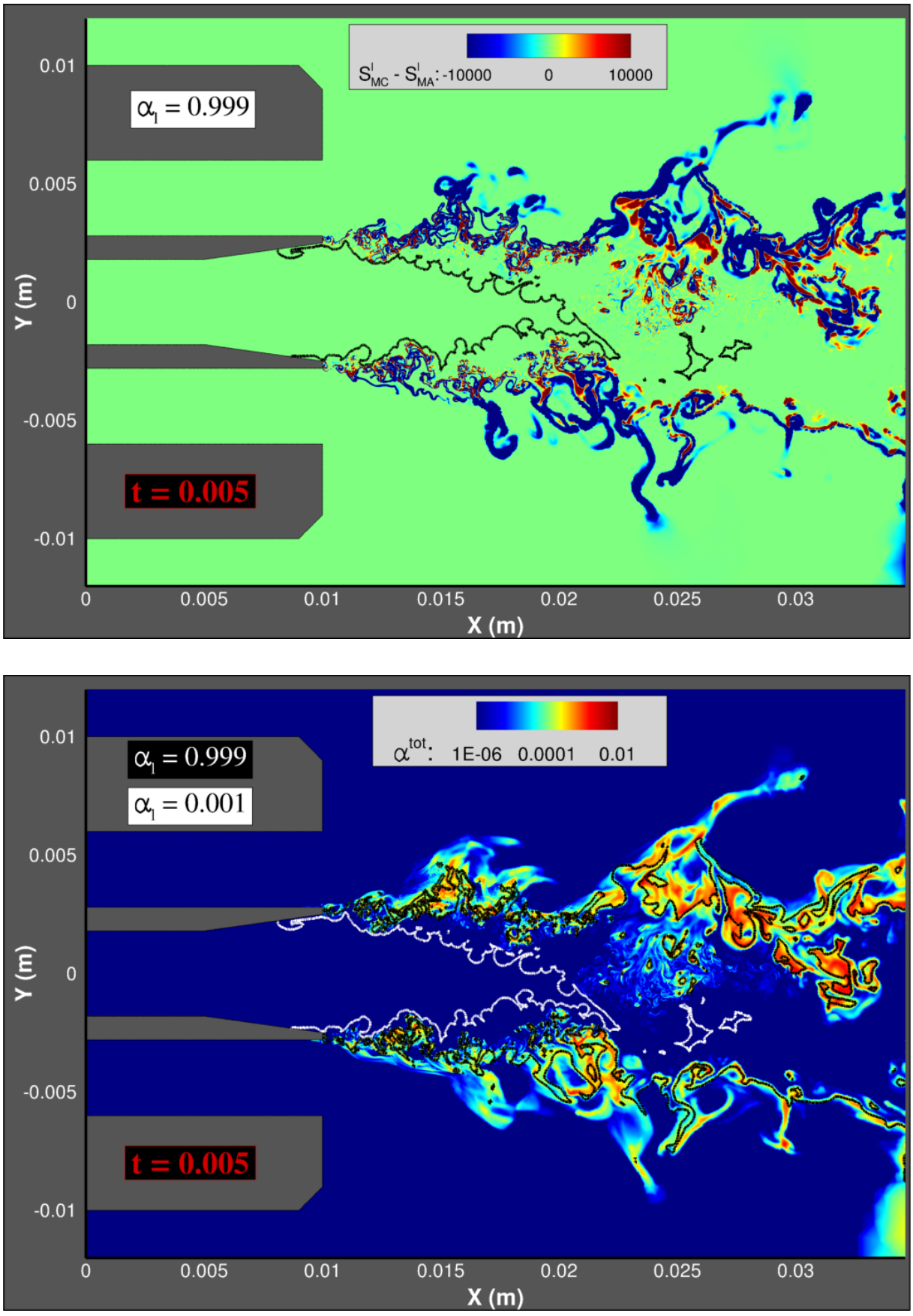


FIGURE 10.25 – *Champs instantanés du terme source de transfert liquide-liquide* $S^I_M = S^I_{M_C} - S^I_{M_A}$ *et de la fraction volumique totale de la phase dispersée. En superposition : deux isocontours de fraction volumique de la phase liquide dans CHARME. Simulation S2 à l'instant final* $t = 0.005$ *s.*

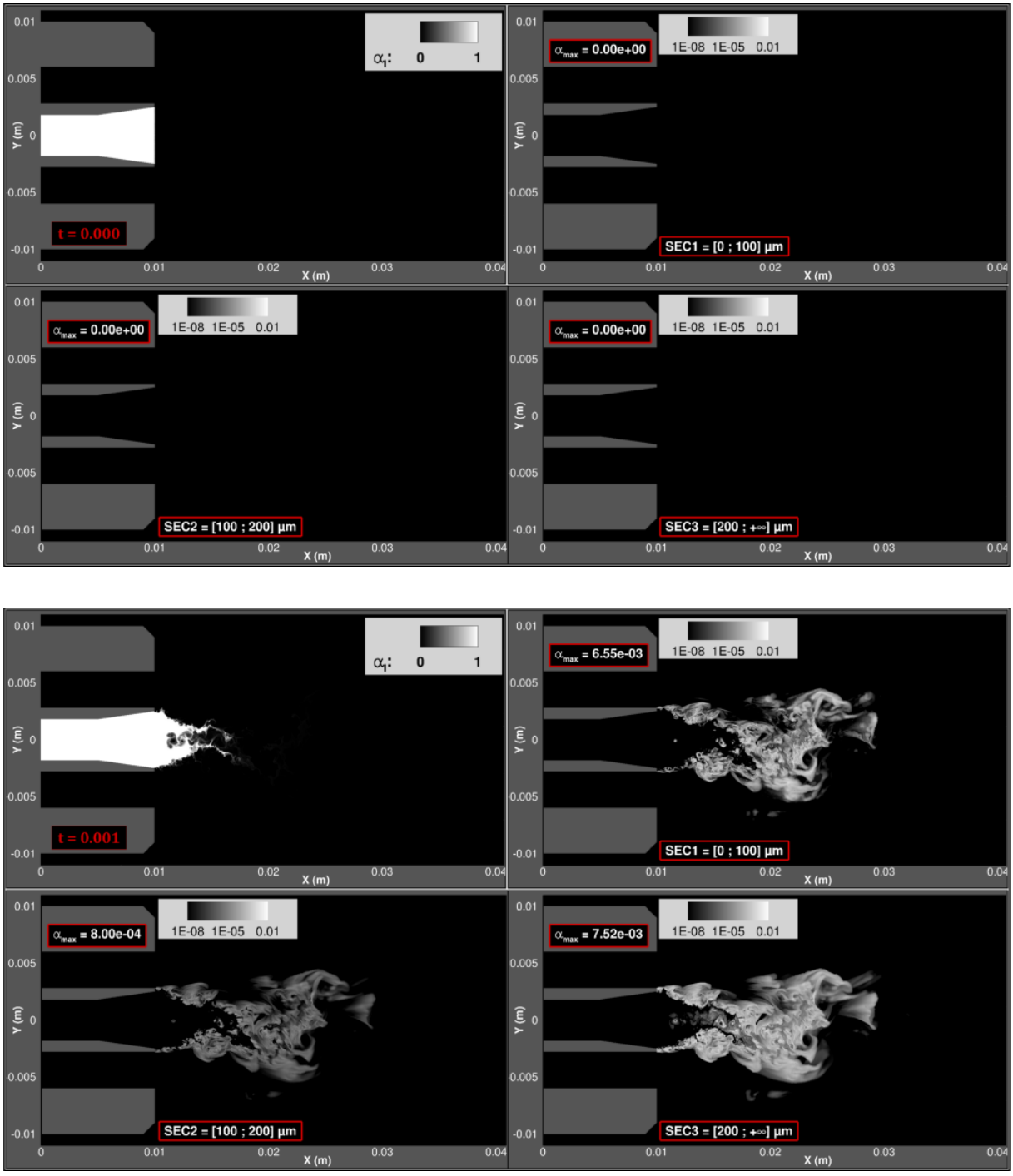


FIGURE 10.26 – *Évolution temporelle des fractions volumiques : phase liquide dans CHARME et les trois sections de la phase dispersée. Simulation S2 pour* $t = 0$ *et* $t = 0.001$ *secondes.*

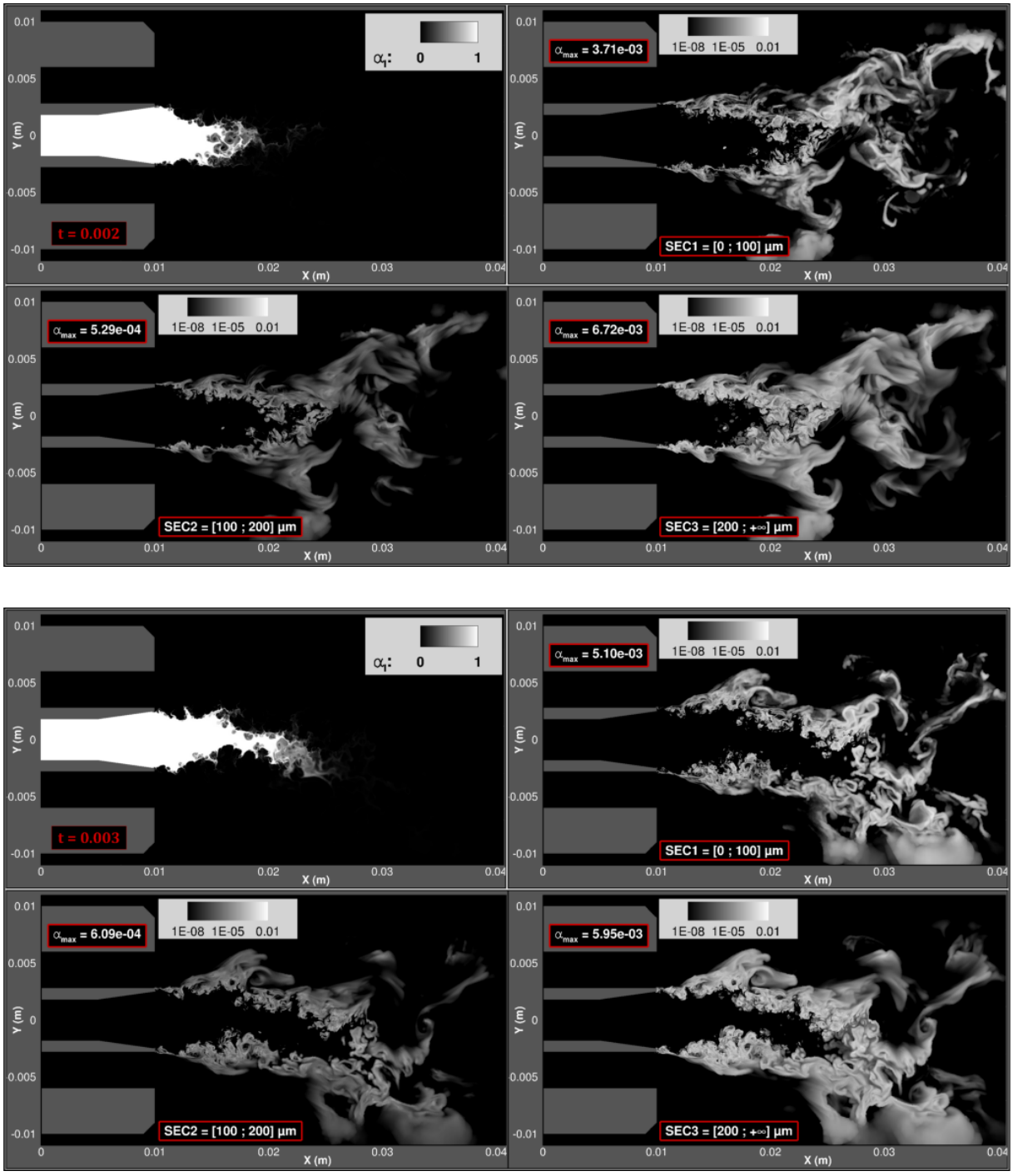


FIGURE 10.27 – *Évolution temporelle des fractions volumiques : phase liquide dans CHARME et les trois sections de la phase dispersée. Simulation S2 pour* $t = 0.002$ *et* $t = 0.003$ *secondes.*

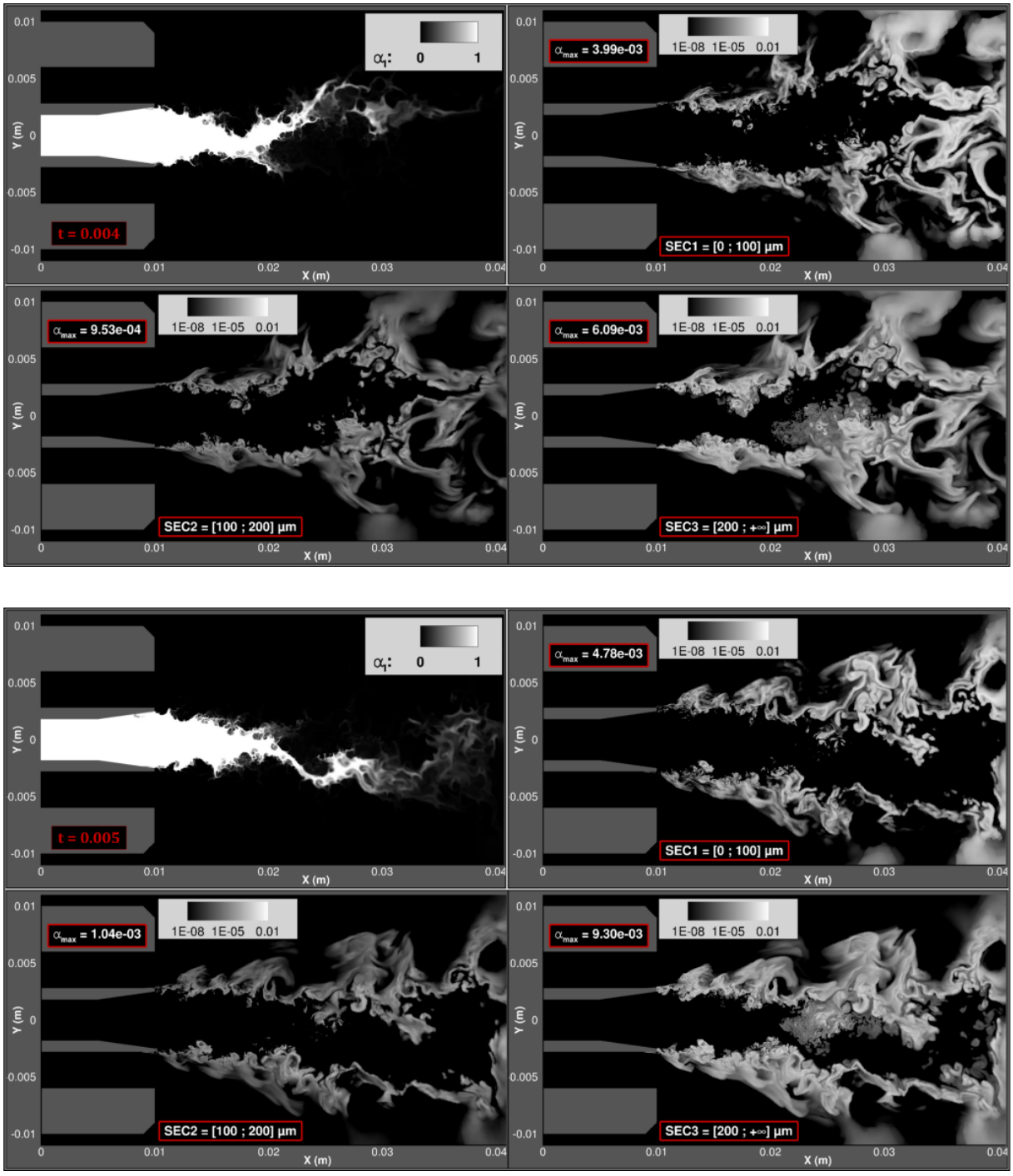


FIGURE 10.28 – ***Évolution temporelle des fractions volumiques : phase liquide dans CHARME et les trois sections de la phase dispersée. Simulation S2 pour*** $t = 0.004$ ***et*** $t = 0.005$ ***secondes.***

Chapitre 11

Application à la combustion cryotechnique sur la configuration du banc Mascotte

Ce chapitre présente les résultats de la première simulation 3D LES du banc Mascotte en conditions réactives (point de fonctionnement subcritique A-10), mettant en œuvre la stratégie de couplage détaillée dans ce manuscrit, et permettant donc une description de la phase liquide depuis l'injection jusqu'à l'évaporation des gouttes, en passant par l'atomisation primaire et secondaire. Nous commençons par présenter la géométrie et le maillage utilisés, puis la mise en données synthétique du calcul CEDRE, ce qui permet de rappeler les modèles et méthodes utilisés. La simulation réalisée intègre une longue période transitoire incluant l'injection de l'oxygène liquide, l'établissement du dard liquide et l'allumage de la flamme. Ce faisant, il apparait que le temps physique calculé dans la simulation actuelle n'est pas suffisant pour considérer que la LES soit convergée. L'analyse de résultats moyennés et leur comparaison à l'expérience n'est donc pas encore complètement pertinente. Cela étant précisé, il reste intéressant de présenter ces résultats moyens et de les comparer aux résultats expérimentaux disponibles. D'une part, cela permet de démontrer la faisabilité de notre approche et le bon comportement des différents modèles et méthodes mis en œuvre, en particulier en ce qui concerne l'aspect diphasique et le traitement de la zone d'atomisation primaire dans un contexte réactif. D'autre part, cela donne une base méthodologique et un point de comparaison pour les simulations futures et leur post-traitement. Par ailleurs, en l'état actuel de la modélisation où les caractéristiques des gouttes atomisées sont postulées (cf. Chapitre 10), il semble peu pertinent de confronter les propriétés des gouttes dans la zone d'atomisation primaire aux données expérimentales. C'est pourquoi les travaux de Gicquel *et al. [106], qui fournissent précisément des informations de granulométrie et vélocimétrie des gouttes* ***relativement loin en aval de l'injection****, constituent pour l'instant la principale base de données expérimentales utile aux comparaisons avec la simulation. Par la suite, les résultats expérimentaux obtenus récemment par* Fdida *et al. [95] sur la configuration du banc Mascotte, qui fournissent notamment des informations pertinentes sur la zone d'atomisation primaire, pourront servir de base de validation à des modèles prédictifs dans cette région de l'écoulement.*

Sommaire

11.1 Géométrie, maillage et mise en données du calcul CEDRE 229
11.2 Évolution temporelle des valeurs moyennes, minimales et maximales 231
11.3 Évolution temporelle de la longueur de dard liquide 233
11.4 Champs moyens pour le fluide 234
11.5 Champs instantanés pour la phase dispersée 239
11.6 Résultats relatifs aux distributions en taille et vitesse des gouttes 243
11.7 Mise en évidence et analyse élémentaire des oscillations de pression 249
11.8 Visualisations qualitatives 253

11.1 Géométrie, maillage et mise en données du calcul CEDRE

Les grandeurs géométriques caractérisant le banc Mascotte et son injecteur pour le point de fonctionnement A-10 ont été présentées au Chapitre 1 (cf. Figure 1.8 et Figure 1.9). La Figure 11.1 représente la CAO de la chambre complète et celle de l'injecteur. Le maillage non structuré utilisé est représenté sur la Figure 11.2. Il est composé d'environ 9,8 millions de tétraèdres et présente un raffinement hétérogène. La taille des plus petits éléments dans la zone d'atomisation primaire est ici de 23,3 µm (à comparer aux 3,39 µm du cas 2D au Chapitre 10), alors que celle des plus gros éléments en fond de chambre est de 3,2 mm. Le maillage est par ailleurs décomposé en 1920 sous-domaines permettant le calcul parallèle sur 480 processeurs.

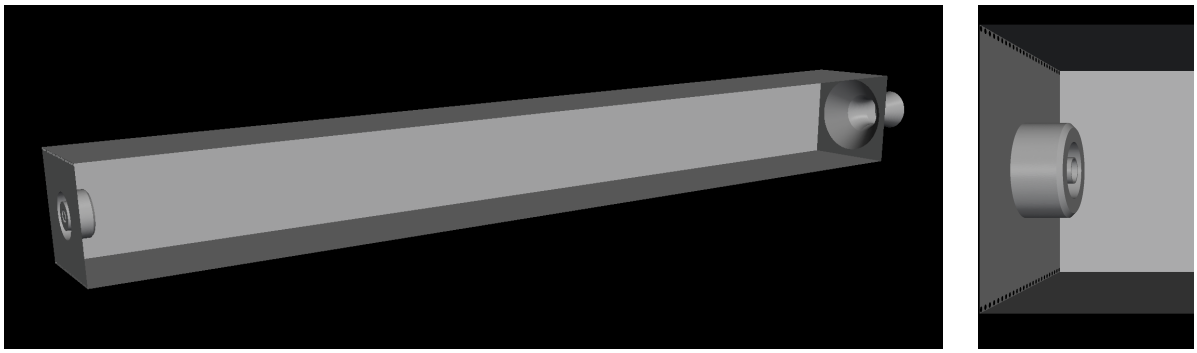


FIGURE 11.1 – *Géométrie 3D du banc Mascotte au point de fonctionnement A-10. Vue d'ensemble à gauche et zoom sur l'injecteur à droite (vue de dessus laissant apparaitre les injections latérales d'hélium).*

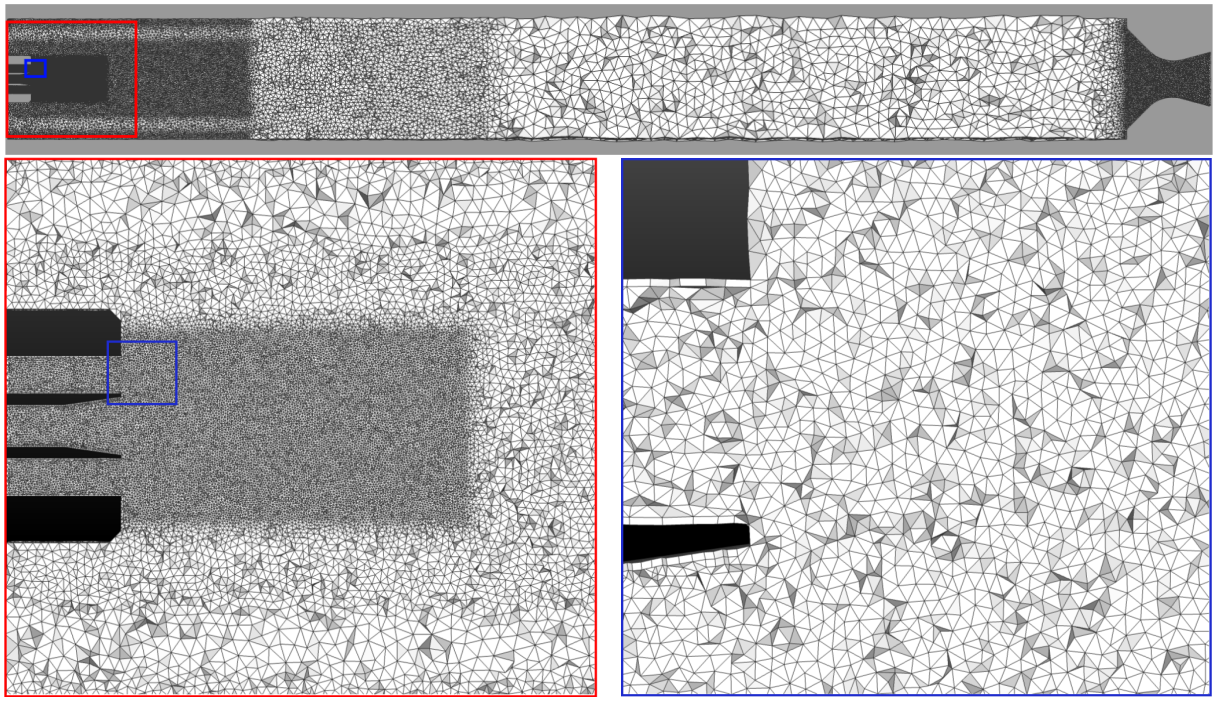


FIGURE 11.2 – *Maillage 3D non structuré tétraédrique. Vue en coupe globale et zoom sur l'injecteur.*

La mise en données du calcul CEDRE est synthétisée dans le Tableau 11.1. Elle reprend l'ensemble de la stratégie présentée dans la Partie II. Les solveurs CHARME et SPIREE sont donc couplés, ce dernier adoptant l'approche sectionnelle pour décrire la distribution en taille de gouttes, représentée par quatre sections (voir la définition de leurs bornes dans le Tableau 11.1). Il est à noter que la quatrième section avait été initialement ajoutée pour des raisons pratiques de robustesse des méthodes numériques (inversion des moments de la distribution et borne infinie), mais qu'elle a vocation à rester vide tout au long de la simulation. En effet, sa borne inférieure est supérieure au diamètre moyen des gouttes atomisées (cf. Chapitre 10), et aucun phénomène n'est susceptible de faire augmenter la taille des gouttes (coalescence entre gouttes non prise en compte et condensation peu probable). Cette quatrième section pourra donc être omise lors de la présentation des résultats.

Le pas de temps d'intégration global est piloté par CHARME et conditionné par un critère de nombre CFL

GÉNÉRALITÉS	
SOLVEURS	CHARME & SPIREE, couplage 2-way
CHRONOLOGIE DU CALCUL	• Δt piloté par CHARME sur critère CFL ($\mathrm{CFL}_{max} = 1,5$), $\Delta t \approx 2 \times 10^{-8}$ s en pratique • Temps physique total calculé ≈ 17 ms (130 calculs de 15 h sur 480 processeurs)
SOLVEUR CHARME	
FLUIDE CHARME	Phase gazeuse : (H_2, He, O_2, H_2O, OH, O, H) Phase liquide : $O_{2(l)}$
MODÈLES PHYSIQUES	• Navier-Stokes sans modèle de turbulence (ILES / MILES) • Combustion : modèle MRE (cf. § 7.3.3), avec constante de réaction $C = 5$, température d'inflammation $T_{inf} = 350$ K, fréquence maximale $f_{max} = 10^5$ s^{-1}
DISCRÉTISATION SPATIALE	• Méthode MUSCL multipente (cf. Chapitre 9), schéma HLLC bas-Mach (cf. Chapitre 8)
INTÉGRATION TEMPORELLE	• Schéma implicite RKI2 (cf. Chapitre 8). Critère de convergence pour GMRES : 10^{-3} et 20 itérations internes au maximum
INITIALISATION	• $Y_{O_{2(l)}} = 1$ dans l'injecteur LOx, $Y_{He} = 1$ ailleurs • $P = 10$ bar • $T = 280$ K ($T \equiv 85$ K pour $O_{2(l)}$, cf. Annexe D) • $\boldsymbol{u} = (4.2, 0, 0)$ dans l'injecteur LOx, $\boldsymbol{u} = (0, 0, 0)$ ailleurs (phase gazeuse au repos)
CONDITIONS AUX LIMITES	• 3 entrées subsoniques : $\left\{ \begin{array}{rcl} T & = & 280\ \mathrm{K} \\ \dot{m}_{inj} & = & 23,7\ \mathrm{g/s} \\ Y_{H_2} & = & 1 \end{array} \right.$, $\left\{ \begin{array}{rcl} T & = & 280\ \mathrm{K} \\ \dot{m}_{inj} & = & 50\ \mathrm{g/s} \\ Y_{O_{2(l)}} & = & 1 \end{array} \right.$, $\left\{ \begin{array}{rcl} T & = & 293\ \mathrm{K} \\ \dot{m}_{inj} & = & 10\ \mathrm{g/s} \\ Y_{He} & = & 1 \end{array} \right.$ • 1 sortie supersonique (après amorçage de la tuyère) • Parois
SOLVEUR SPIREE	
MODÈLES PHYSIQUES	• Méthode sectionnelle (cf. Chapitre 3, Chapitre 6) avec 4 sections (bornes en µm) : $I_s^{(1)} = [0, 40[$, $I_s^{(2)} = [40, 120[$, $I_s^{(3)} = [120, 280[$, $I_s^{(4)} = [280, +\infty[$ • Termes sources de trainée, transfert de chaleur et évaporation (cf. Chapitre 7) • Fragmentation secondaire (cf. Chapitre 7) • Atomisation primaire et pseudo-coalescence (cf. Chapitre 10)
DISCRÉTISATION SPATIALE	• Méthode MUSCL multipente (cf. Chapitre 9), schéma de Godunov (cf. Chapitre 8)
INTÉGRATION TEMPORELLE	• Splitting de Lie (cf. Chapitre 8) • Schéma explicite RK2 pour le transport SPIREE • Schéma d'Euler explicite pour les termes sources de couplage (4 itérations de relaxation)
INITIALISATION	Vide de particules
CONDITIONS AUX LIMITES	1 sortie + parois (pas d'injection)

TABLEAU 11.1 – ***Mise en données CEDRE pour la simulation 3D.***

maximum égal à 1,5. En pratique, cela conduit très rapidement à un pas de temps quasiment constant, de l'ordre de $\Delta t = 2 \times 10^{-8}$ secondes. Le temps physique total qui a pu être calculé à l'issue de la simulation est donc relativement faible. Il n'est que de 17 ms environ, valeur que l'on peut comparer au temps de séjour des gaz de combustion dans la chambre. Celui-ci représente la valeur moyenne du temps passé par une particule fluide dans le volume de la chambre, et il est défini par la relation

$$t_s = \frac{\rho_{moy} V_0}{\sum \dot{m}}, \tag{11.1}$$

où ρ_{moy} est la masse volumique moyenne des fluides séjournant dans la chambre de combustion, V_0 le volume de celle-ci et $\sum \dot{m}$ la somme des débits massiques injectés. Un calcul du temps de séjour a posteriori (avec une valeur moyenne de la masse volumique issue du calcul) donne une valeur comprise entre $t_s = 7$ ms et $t_s = 10$ ms, selon que l'on considère uniquement les gaz dans le calcul de ρ_{moy} où bien que l'on intègre aussi la phase liquide. Quoi qu'il en soit, il apparait que le temps physique total calculé ne correspond qu'à environ deux fois le temps de séjour. C'est donc très peu, d'autant plus que la simulation intègre le régime transitoire. Par ailleurs, cette simulation de 17 ms de temps physique a nécessité 130 calculs successifs sur le calculateur Stelvio de l'ONERA. A raison de 15 h de restitution en moyenne par calcul et de 480 processeurs utilisés, cela correspond à une consommation CPU totale d'environ 950k heures.

Stratégie d'initialisation

Puisque nous avons choisi d'intégrer toute la phase transitoire à la simulation instationnaire, l'initialisation du tout premier calcul se fait donc sans réactifs ni produits de combustion dans la chambre et à une température ambiante. On choisit malgré tout d'initialiser la pression de la chambre à 10 bar, qui est la pression de fonctionnement nominale attendue, de manière à diminuer la période transitoire. En outre, la phase gazeuse est composée uniquement d'hélium à l'instant initial, espèce chimique inerte qui est ensuite injectée tout au long de la simulation et qui sert à refroidir les parois latérales sur le dispositif expérimental. Cela permet d'économiser une espèce inerte supplémentaire (air ou azote). L'état initial comprend également de l'oxygène liquide dans la partie de l'injecteur qui est intégrée à la géométrie. Quant à la phase dispersée, elle n'existe pas à l'état initial et ne sera jamais introduite au cours du calcul via une condition limite. Elle ne peut être créée que par le terme source d'atomisation primaire.

Par ailleurs, le débit d'hydrogène n'est pas fixé à sa valeur nominale dès le début du calcul. Étant donnée la vitesse très importante de l'hydrogène à l'injection, il en résulterait une onde de pression de très forte amplitude dont on conserverait probablement la trace tout au long de la simulation. C'est précisément ce que l'on avait observé et relevé au Chapitre 10. Le débit d'hydrogène a donc été augmenté progressivement jusqu'à sa valeur nominale. Enfin, ajoutons également que les premiers calculs ont été réalisés sur un maillage plus grossier (environ 1 million d'éléments) que celui présenté sur la Figure 11.2, de manière à accélérer la mise en place du calcul, avant que la solution ne soit projetée sur le maillage final à partir d'un temps physique correspondant à environ 3 ms.

Il aurait été possible de procéder différemment, par exemple en atteignant un régime moyen stationnaire par un premier calcul RANS plus rapide, avant de reprendre le calcul en LES. Néanmoins, il aurait fallu pour cela adapter la stratégie et les modèles (combustion, termes sources d'atomisation primaire, interaction entre la phase dispersée et la phase gazeuse...). Cela demande probablement une attention particulière, sans certitude par ailleurs que la transition RANS-LES se déroule sans problème. Une telle démarche mériterait d'être menée et constitue donc une piste de travail ultérieure. En l'état actuel, nous conservons la même stratégie tout au long du calcul, ce qui présente l'intérêt de démontrer sa capacité à décrire la période transitoire, objectif loin d'être évident étant donné l'ensemble des phénomènes mis en jeu et de leurs interactions : injection de l'oxygène liquide et mise en place du dard liquide, génération des premières gouttes, fragmentation et évaporation de celles-ci, et enfin allumage et stabilisation de la flamme.

11.2 Évolution temporelle des valeurs moyennes, minimales et maximales

Pour commencer, nous allons présenter quelques historiques pertinents permettant de caractériser le déroulement global de la simulation. La Figure 11.3 représente l'évolution temporelle de la pression (valeurs maximale, minimale et moyenne) et de la température (valeurs maximale et moyenne) du fluide CHARME. La Figure 11.4 représente l'évolution temporelle des valeurs maximales de la fraction volumique pour chacune des trois sections non vides de la phase dispersée (solveur SPIREE).

La pression moyenne diminue d'abord de 3 bar, passant des 10 bar initiaux à une valeur minimale de 7 bar entre $t = 0$ et $t = 4$ ms, avant que les premières gouttes générées et évaporées ne permettent l'allumage de la flamme et la remontée en pression. Ainsi, entre $t = 4$ et $t = 13$ ms, la pression moyenne de la chambre remonte jusqu'à une valeur maximale de 10,7 bar, puis rediminue légèrement jusqu'à l'instant final ($t = 17$ ms), où elle s'établit à 10,1

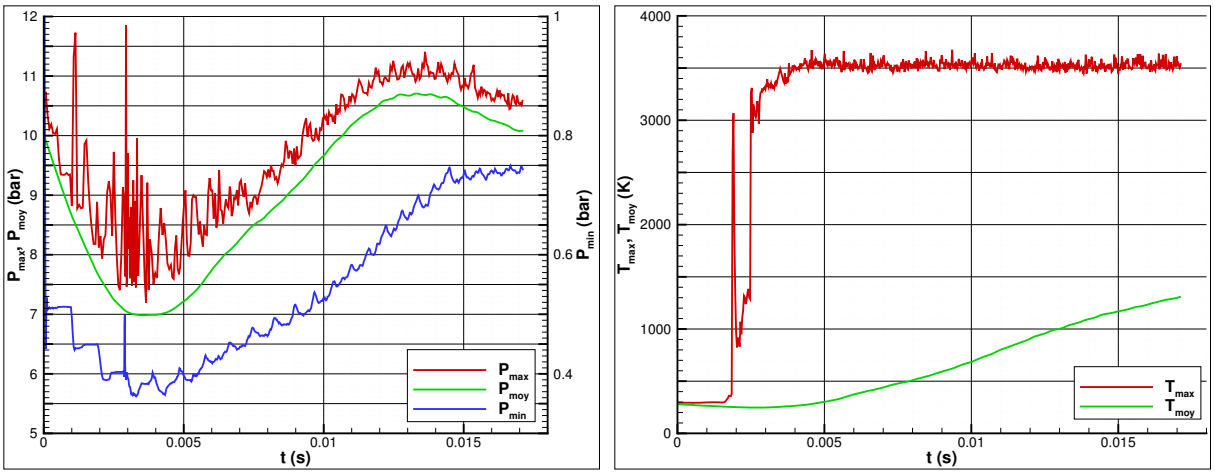


FIGURE 11.3 – ***Évolution temporelle de la pression et de la température du fluide CHARME : valeurs minimales (pression uniquement), maximales et moyennes.***

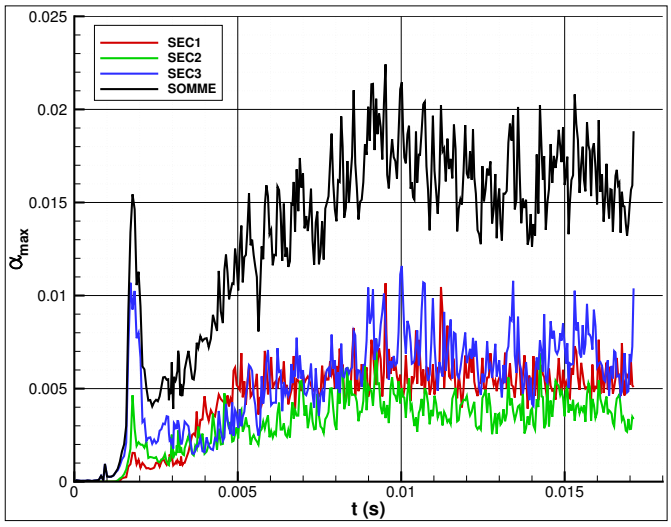


FIGURE 11.4 – ***Évolution temporelle des valeurs maximales de la fraction volumique de la phase dispersée (solveur SPIREE) : sections 1 à 3 et somme sur les sections.***

bar. Si le calcul était poursuivi, il est probable que cette pression moyenne augmente de nouveau et éventuellement se stabilise à une valeur légèrement supérieure, la pression nominale moyenne de fonctionnement effectivement observée expérimentalement étant de 11,0 bar (VINGERT [289]). La température moyenne est en augmentation constante tout au long de la simulation, même si cette augmentation semble ralentir aux derniers instants du calcul. Par ailleurs, l'évolution de la température maximale est révélatrice d'une température de flamme dont la valeur maximale s'établit dès $t = 4$ ms (moment à partir duquel la pression moyenne réaugmente), et à une valeur approximative oscillant entre 3500 et 3600 K. Enfin, l'évolution des valeurs maximales de fraction volumique montre une augmentation globale et finalement une stabilisation pour les trois sections. On note également que la valeur maximale de la fraction volumique totale (sommée sur les sections) s'établit aux alentours de 0,02.

Comme cela a été souligné en introduction de ce chapitre, il apparait donc clairement à la vue des signaux de pression et de température moyennes que le temps physique simulé n'est pas suffisant pour considérer que la phase transitoire est terminée, et donc a fortiori que la simulation est convergée en moyenne. Cela étant, nous allons malgré tout représenter des champs moyens pour le fluide CHARME au paragraphe § 11.4, calculés sur une période de temps restreinte à l'intervalle $t \in [13, 17]$ ms. Cela permet de valider le bon comportement de la stratégie de couplage et des différents modèles et méthodes mis en œuvre. Cela permet également de poser les bases d'une méthodologie de post-traitement utile aux simulations futures, en rassemblant par exemple quelques résultats expérimentaux utilisables à des fins de comparaison.

11.3 Évolution temporelle de la longueur de dard liquide

Afin d'évaluer la longueur de dard liquide et son évolution au cours du temps, nous reprenons la procédure utilisée au Chapitre 10 (cf. § 10.5 et la Figure 10.17), en l'adaptant simplement à la géométrie 3D. Il s'agit donc de mesurer le volume $\mathcal{V}$ caractérisé par une fraction volumique de la phase liquide dans CHARME supérieure à un seuil donné (en dehors de l'injecteur d'oxygène liquide), et à en déduire la longueur L du cône de volume équivalent par la relation

$$L = \frac{12\mathcal{V}}{\pi D^2}\,, \tag{11.2}$$

connaissant par ailleurs la valeur $D = 5$ mm du diamètre de l'injecteur (cf. Figure 1.9 au Chapitre 1).

Comme nous l'avions déjà évoqué au Chapitre 10, il faut être vigilant au choix de la valeur seuil. En effet, la longueur de dard liquide obtenue peut diminuer significativement sous l'effet de la diffusion numérique à mesure que la valeur seuil tend vers 1. C'est ce que révèle la Figure 11.5, où l'on a comparé la longueur de dard liquide donnée par cette procédure en fonction du choix de la valeur seuil, à un instant donné du présent calcul 3D (en l'occurrence $t = 12{,}83$ ms) et à un autre instant quelconque du calcul 2D réalisé au Chapitre 10 sur un maillage plus fin (à l'instant $t = 5$ ms). La valeur de α_{seuil} =0,99 est finalement choisie pour tracer l'évolution de la longueur de dard liquide au cours du temps (cf. Figure 11.6).

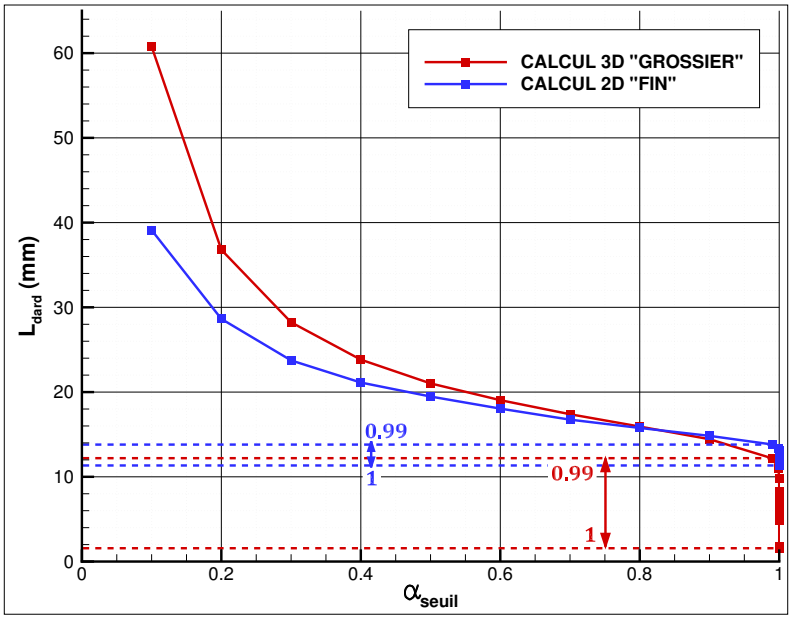


FIGURE 11.5 – *Longueur de dard liquide en fonction de α_{seuil}. Comparaison avec la simulation 2D du Chapitre 10 sur un maillage plus fin.*

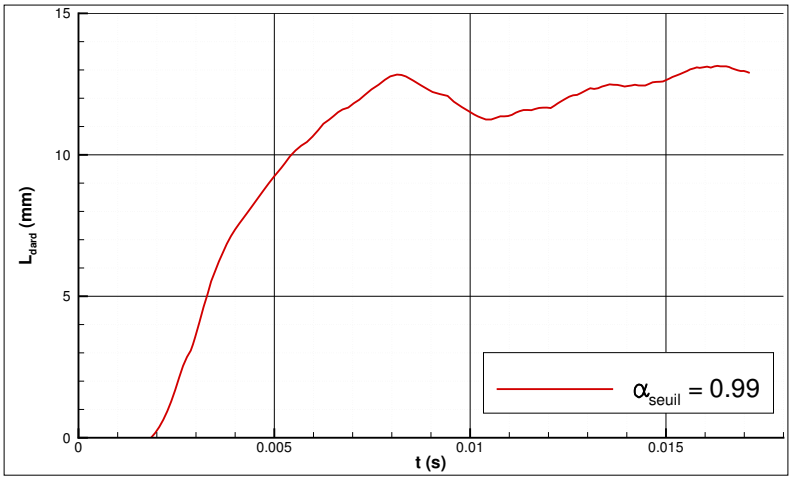


FIGURE 11.6 – *Évolution de la longueur de dard liquide au cours du temps (α_{seuil} = 0,99).*

Il apparait que la longueur de dard liquide augmente logiquement au cours du temps, et finit par se stabiliser en moyenne entre 11 et 13 mm, à partir de l'instant $t = 8$ ms. Cette valeur est à comparer aux corrélations théoriques et expérimentales, dont l'application au cas Mascotte au Chapitre 2 avait fourni différentes valeurs, allant de 8 à 41 mm (cf. § 2.3.4). La valeur obtenue ici est donc comprise dans cette fourchette, et elle est plus proche de la valeur de 8 mm fournie par la corrélation (2.18) qui est probablement la plus répandue. Il faut cependant être prudent sur ce point, étant donné à la fois l'influence importante du choix de la valeur seuil, et la forte disparité des valeurs données par les corrélations.

11.4 Champs moyens pour le fluide

Les champs moyens présentés dans ce paragraphe ont été calculés sur l'intervalle $t \in [13, 17]$ ms, avec un échantillonnage égal au pas de temps. Ils sont présentés pour chaque variable dans deux plans de coupe différents passant par le centre de la géométrie : un plan (XZ) longitudinal-transversal, et un plan (XY) longitudinal-vertical. L'axe vertical est en effet bien l'axe Y et non l'axe Z comme c'est généralement le cas. Ainsi, les films d'hélium injectés le long des parois latérales sont directement visibles dans le plan (XZ), qui constitue une "vue de dessus", mais pas dans le plan (XY) qui constitue une "vue latérale", c'est-à-dire la vue réelle de l'expérimentateur. A noter également que l'on ne présente pas de champs moyens relatifs à la phase dispersée, cette possibilité n'étant pas intégrée au solveur SPIREE au moment où les calculs ont été effectués.

La Figure 11.7 montre ainsi les champs moyens de température, desquels sont extraits des profils radiaux comparés sur la Figure 11.8 à des données expérimentales obtenues par thermométrie DRASC [1] sur la molécule d'hydrogène (VINGERT [289]). A noter que le rapport VINGERT [289] donne la position longitudinale de ces profils avec pour origine la sortie de l'injecteur, et non pas le fond avant de la chambre comme c'est le cas dans notre calcul. Il en résulte un décalage de 10 mm entre les valeurs. Par ailleurs, il faut garder à l'esprit que ces données expérimentales sur la température souffrent d'un taux de validation [2] potentiellement faible (voir les pourcentages sur la Figure 11.8) et peuvent présenter un écart-type très important de part et d'autre de la valeur moyenne [3] (voir les barres d'erreur sur la Figure 11.8).

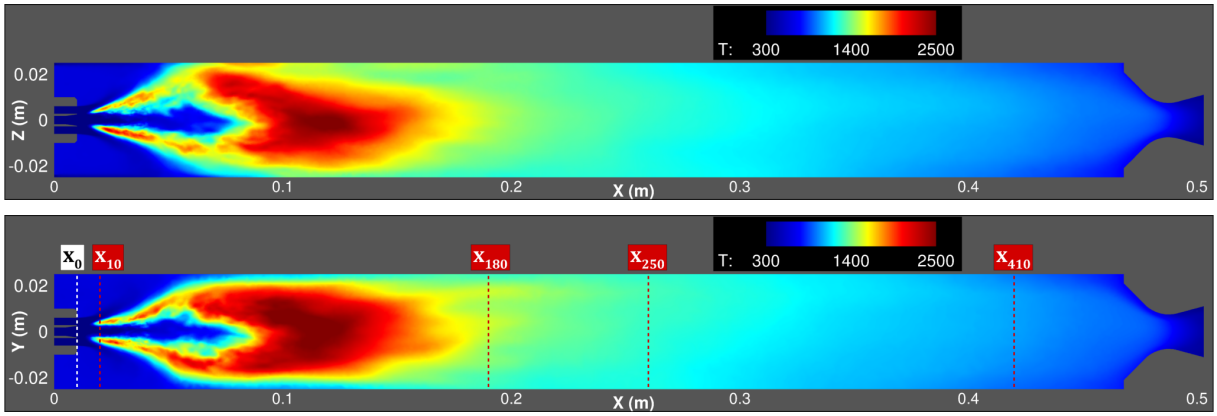


FIGURE 11.7 – ***Température moyenne du fluide CHARME et localisation des profils radiaux pour comparaison avec les données DRASC expérimentales.***

La Figure 11.9 représente les champs moyens de la norme de vitesse du fluide CHARME en échelle logarithmique. On observe ainsi la circulation du jet annulaire d'hydrogène à haute vitesse, entourant une zone à basse vitesse constituée par le jet d'oxygène liquide qui s'atomise. Les films d'hélium sont bien visibles dans le plan (XZ), et il apparait également une zone à faible vitesse à l'extérieur de l'écoulement d'hydrogène, correspondant à une recirculation.

Les champs moyens de masse volumique du fluide CHARME sont représentés sur la Figure 11.10 en échelle logarithmique. Il apparait une zone conique [4] de densité maximale à la sortie de l'injecteur d'oxygène, longue d'une dizaine de millimètres, révélant la présence du dard liquide. Autour et en aval de cette zone, la densité moyenne du fluide CHARME traduit la présence simultanée des phases liquide et gazeuse. C'est dans cette zone

1. Diffusion Raman Anti-Stokes Coherent ou CARS en anglais.
2. Défini ici comme le rapport du nombre de mesures instantanées exploitables sur le nombre de mesures total.
3. Ces écarts-types importants sont dus aux fluctuations importantes du milieu, et pas à la précision de la méthode qui est de l'ordre de 100 K (VINGERT [289]).
4. Il est très probable que cette conicité serait davantage marquée si les champs moyens avaient pu être calculés sur une période de temps plus importante.

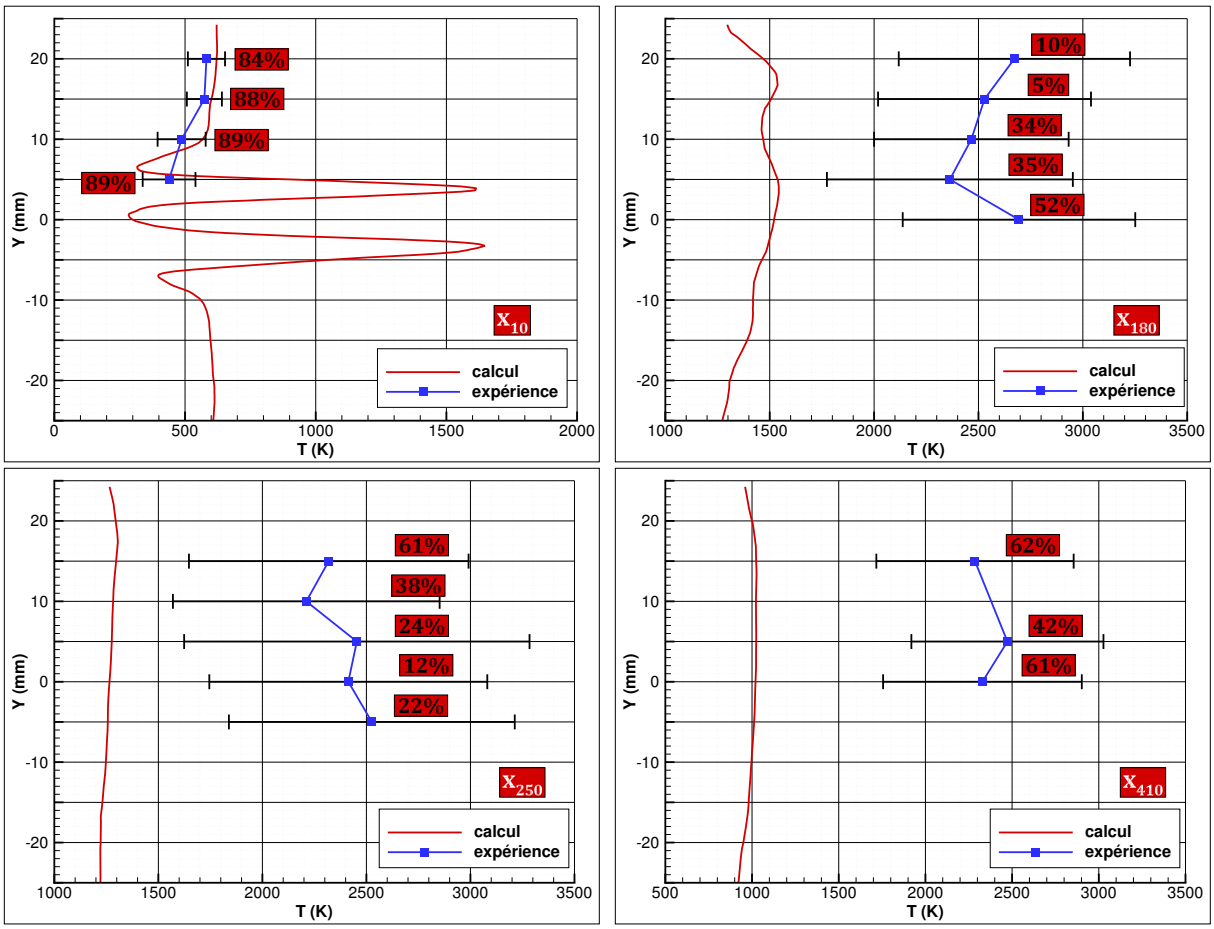


FIGURE 11.8 – *Profils radiaux de température issus du champ moyen et comparaison avec les données DRASC expérimentales. Pourcentages : taux de validation des mesures. Barres d'erreur : écarts-types des mesures instantanées.*

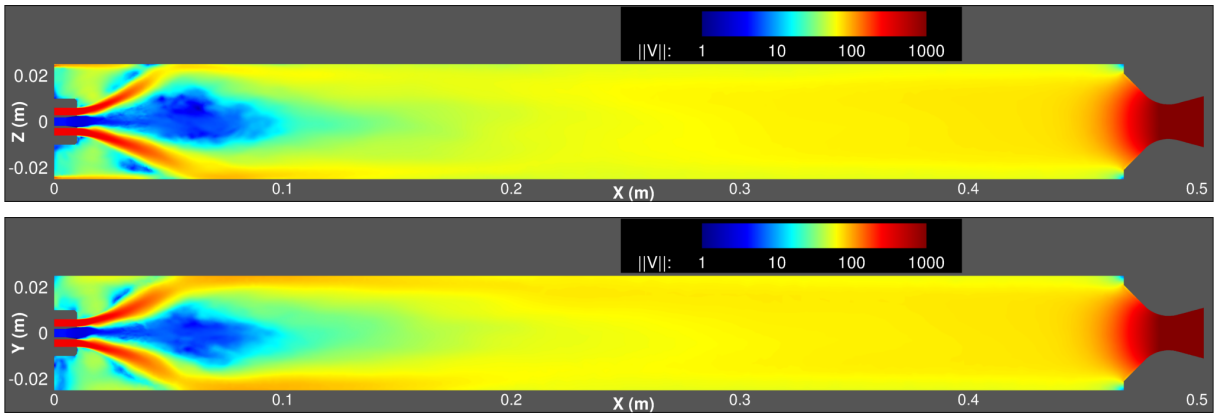


FIGURE 11.9 – *Vitesse moyenne du fluide CHARME en échelle logarithmique.*

que la transition s'opère entre les topologies d'écoulement diphasique à phases séparées et à phase dispersée, et c'est par conséquent ici que le transfert entre les solveurs CHARME et SPIREE doit avoir lieu. En outre, c'est également dans cette région de l'écoulement que l'utilisation d'un modèle à 7 équations montrerait certainement son avantage par rapport au modèle à fluide homogène mis en œuvre par le solveur CHARME, en permettant la description de chaque phase par sa propre pression, vitesse et température (cf. Chapitre 3).

Les Figure 11.11 et Figure 11.12 représentent les champs moyens de fraction massique des espèces respectives oxygène liquide et oxygène gazeux, ce dernier étant produit par l'évaporation des gouttes préalablement issues de l'atomisation de l'oxygène liquide. On note une présence maximale de l'oxygène sous forme vapeur à proximité immédiate des lèvres de l'injecteur. En revanche, les valeurs de la fraction massique sont relativement faibles, signe que l'oxygène est consommé très rapidement après l'évaporation, dès lors qu'il est en contact avec l'hydrogène

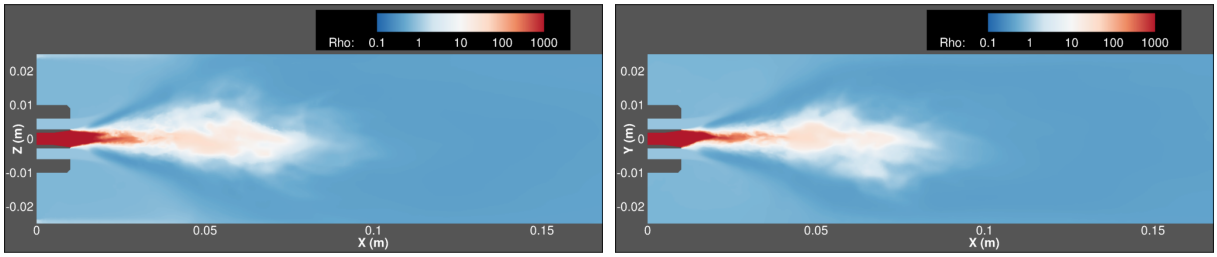


FIGURE 11.10 – ***Masse volumique moyenne du fluide CHARME en échelle logarithmique.***

gazeux représenté sur la Figure 11.13. Cette réaction chimique génère des produits de combustion, majoritairement de la vapeur d'eau H_2O (cf. Figure 11.14), mais également des espèces radicalaires OH, O et H, dont les champs de fraction massique moyenne sont respectivement représentés sur les Figure 11.15, Figure 11.16 et Figure 11.17. L'émission spontanée du radical OH est d'ailleurs un moyen utilisé expérimentalement pour caractériser la présence de la flamme (VINGERT [289]). La Figure 11.18 présente ainsi une comparaison qualitative entre le champ moyen de la fraction massique du radical OH obtenu par le calcul dans le plan longitudinal-vertical (XY), et une visualisation expérimentale traitée par une transformation d'Abel (déconvolution) de manière à se ramener dans le même plan vertical (VINGERT [289]). La comparaison semble relativement satisfaisante, autant en ce qui concerne l'angle d'ouverture de la flamme que son accrochage à proximité immédiate des lèvres de l'injecteur.

Enfin, la Figure 11.19 représente les champs moyens de la fraction massique d'hélium. Il s'agit d'un gaz inerte injecté le long des parois latérales de manière à les refroidir, et ainsi permettre les visualisations expérimentales. Ici, la présence d'hélium en quantité relativement importante dans le fond avant et en sortie de la chambre est un reliquat de l'initialisation du calcul. En ce qui concerne sa présence en sortie de chambre et dans la tuyère, cela révèle encore une fois que la phase transitoire du calcul n'est pas terminée.

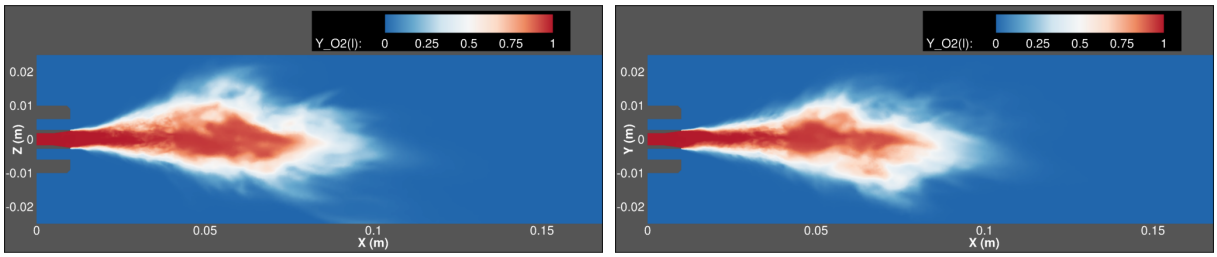


FIGURE 11.11 – *Fraction massique moyenne d'oxygène liquide.*

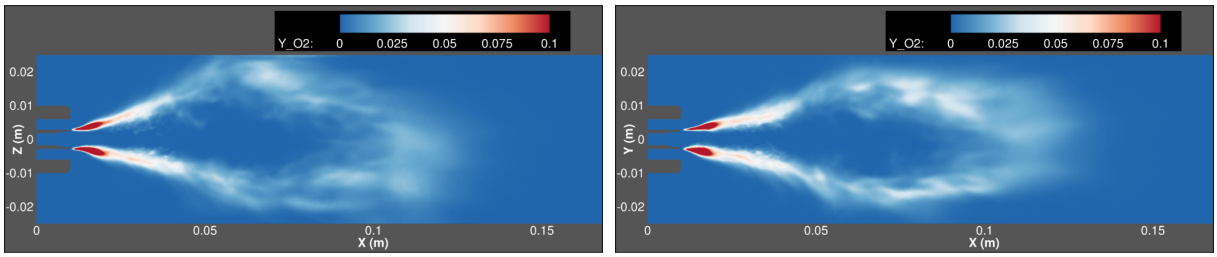


FIGURE 11.12 – *Fraction massique moyenne d'oxygène gazeux.*

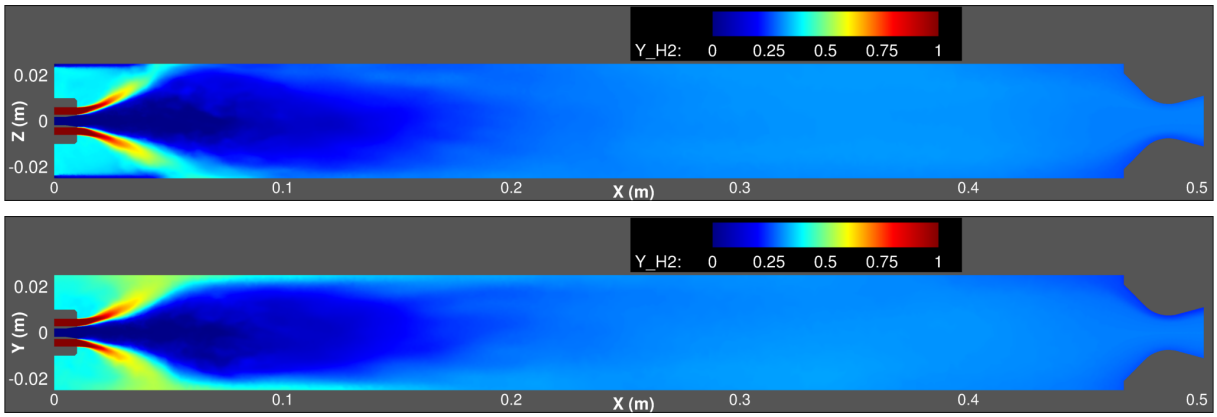


FIGURE 11.13 – *Fraction massique moyenne d'hydrogène gazeux.*

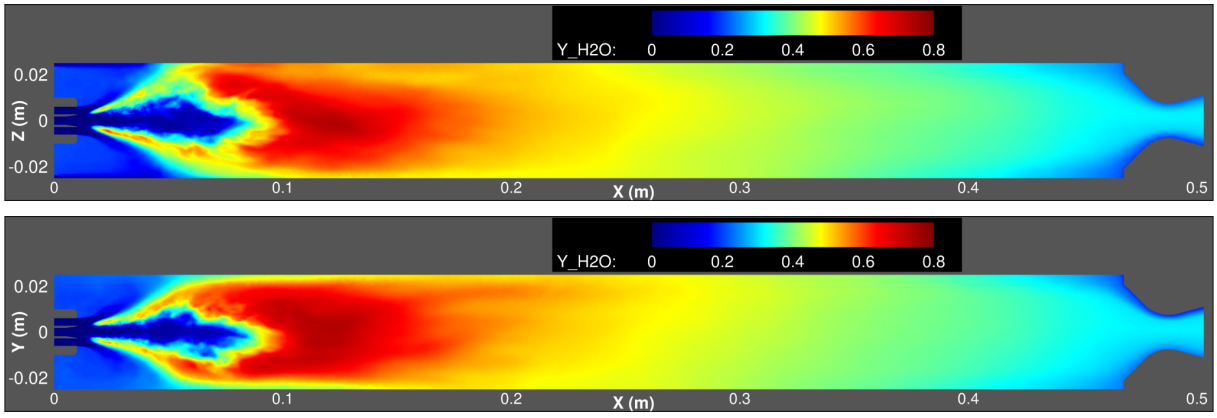


FIGURE 11.14 – *Fraction massique moyenne de vapeur d'eau.*

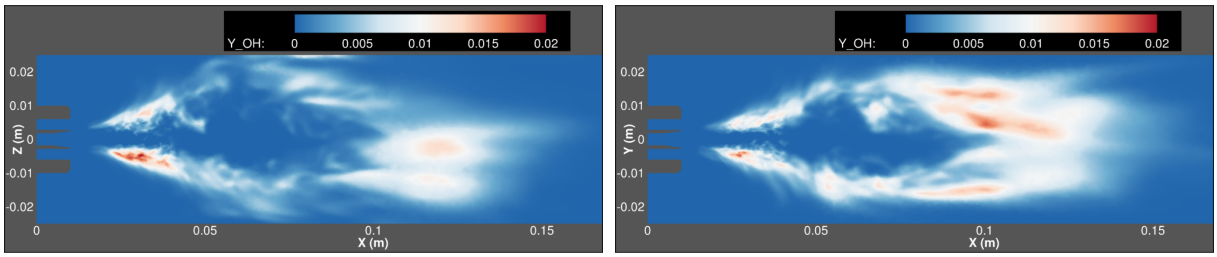


FIGURE 11.15 – *Fraction massique moyenne du radical OH.*

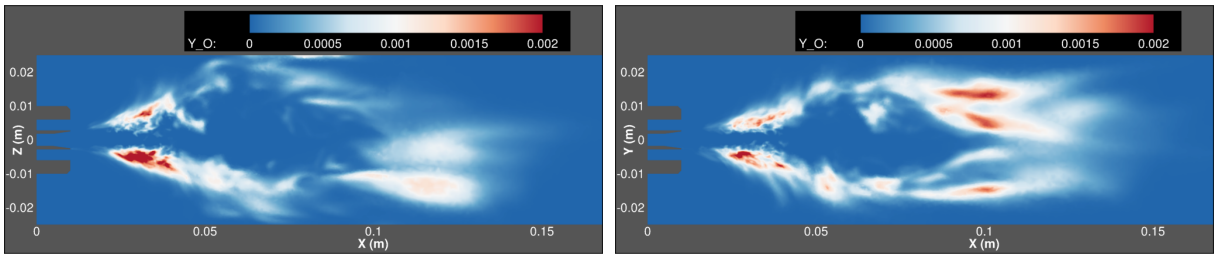


FIGURE 11.16 – *Fraction massique moyenne du radical O.*

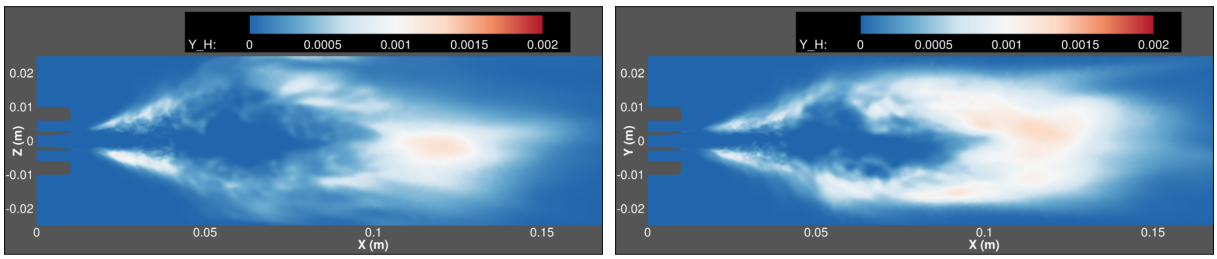


FIGURE 11.17 – *Fraction massique moyenne du radical H.*

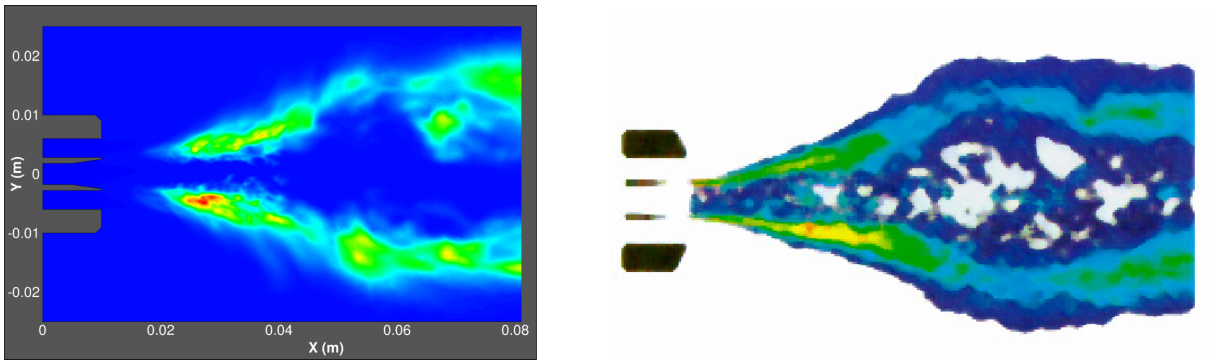


FIGURE 11.18 – *Fraction massique moyenne du radical OH issue de la simulation (à gauche) comparée à une visualisation expérimentale obtenue par déconvolution (*VINGERT *[289]).*

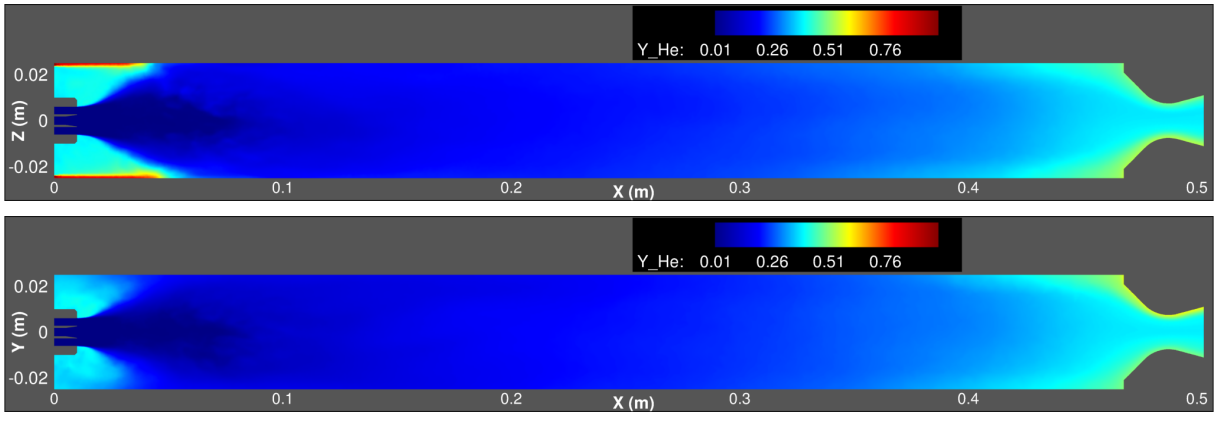


FIGURE 11.19 – *Fraction massique moyenne d'hélium.*

11.5 Champs instantanés pour la phase dispersée

Comme expliqué dans le paragraphe précédent, il n'est pas possible à l'heure actuelle d'obtenir des champs moyens pour la phase dispersée, cette fonctionnalité n'étant pas encore intégrée au solveur SPIREE. Nous présentons donc ici des champs instantanés correspondant à l'instant final de la simulation (t = 17 ms). De la même manière que pour les champs moyens du fluide CHARME, les champs instantanés sont présentés dans deux plans de coupe différents passant par le centre de la géométrie : un plan (XZ) longitudinal-transversal, et un plan (XY) longitudinal-vertical. Les Figure 11.20, Figure 11.21 et Figure 11.22 représentent respectivement les champs de fraction volumique de la première, deuxième et troisième section de la phase dispersée, tandis que la Figure 11.23 représente le champ de fraction volumique totale. Il apparait que la zone de présence de la phase dispersée ne s'étend guère au-delà du premier tiers de la chambre.

La Figure 11.24 représente le terme source de transfert liquide-liquide $S^l_M = S^l_{M_C} - S^l_{M_A}$, c'est-à-dire le flux net entre les transferts par pseudo-coalescence et par atomisation primaire [5]. Les zones colorées en bleu correspondent à un transfert par atomisation primaire, de CHARME vers SPIREE, tandis que les zones en rouge représentent le transfert inverse par pseudo-coalescence, de SPIREE vers CHARME. Assez logiquement, le transfert par atomisation primaire est prépondérant, le flux net global étant évidemment positif puisque la phase dispersée n'est créée que par l'atomisation primaire. On constate également que les transferts liquide-liquide ont lieu principalement dans la zone située immédiatement en aval de l'injecteur, au niveau de la couche de mélange entre l'oxygène liquide et l'hydrogène gazeux à haute vitesse. Ce résultat est logique étant donnée l'expression du modèle d'atomisation (cf. Chapitre 10), puisque c'est dans cette zone que le gradient de vitesse est le plus important. En revanche, dans la zone centrale située plus en aval, où le fluide CHARME est diphasique (cf. Figure 11.10 et Figure 11.11) mais la vitesse de l'écoulement très faible (cf. Figure 11.9), il apparait logiquement que le transfert liquide-liquide est très faible voire inexistant. La phase liquide continue donc à être traitée par le solveur CHARME. Dans la réalité, la phase liquide ne se trouve pas sous forme dispersée dans cette zone, mais présente plutôt une topologie d'***écoulement diphasique mixte***, où les structures liquides possèdent des formes aléatoires et sont de taille relativement importante, l'agitation du mélange gazeux environnant n'étant pas suffisante pour fragmenter ces structures et générer des gouttes. Le fait que la phase liquide continue à être décrite dans cette zone par le solveur "phases séparées", en l'occurrence CHARME, est donc pertinent. En revanche, il est fort probable que c'est précisément dans cette région de l'écoulement que les limitations propres à la modélisation en fluide homogène se font le plus ressentir. Notamment, il serait très intéressant d'évaluer l'apport d'une modélisation permettant de décrire chaque phase avec sa propre vitesse et température (modèle à 7 équations par exemple), et intégrant également une description de la densité d'aire interfaciale. En effet, même lorsque la topologie de l'écoulement n'est pas celle d'un écoulement à phase dispersée, il est possible que le chauffage et l'évaporation de la phase liquide aient un impact non négligeable sur la quantité d'oxygène évaporé, et donc globalement sur la combustion.

Les Figure 11.25, Figure 11.26, Figure 11.27, Figure 11.28, Figure 11.29 et Figure 11.30 représentent les champs de température et de débit d'évaporation pour chacune des trois sections. Le débit d'évaporation correspond au terme source à l'échelle de la goutte, intégré sur l'intervalle de taille de chaque section, et multiplié par la densité en nombre de gouttes. Il s'agit donc du terme $n^{(k)}\dot{m}_v^{(k)}$ qui apparait dans le système d'équations (6.11) du Chapitre 6. Les gouttes les plus petites ayant les temps de chauffage les plus courts, il apparait logiquement que les gouttes de la première section atteignent le plus rapidement leur température de saturation. La Figure 11.25 montre même qu'elles atteignent cette température de saturation quasiment dès la sortie de l'injecteur, si bien que le champ de température pour la première section est relativement homogène. Les gouttes des deuxième et troisième sections mettent en revanche plus de temps à atteindre la saturation, d'où l'hétérogénéité des champs de température correspondants (cf. Figure 11.27 et Figure 11.29). Les champs de débit d'évaporation sont tout à fait cohérents avec les champs de température, le débit d'évaporation étant quasiment nul tant que les gouttes n'ont pas atteint la température de saturation. En effet, même pour les grosses gouttes dont le temps de chauffage est manifestement non négligeable, celui-ci reste très inférieur au temps caractéristique du transfert de masse par diffusion moléculaire.

Enfin, les Figure 11.31, Figure 11.32, Figure 11.33, Figure 11.34, Figure 11.35 et Figure 11.36 représentent les champs du nombre de Weber (cf. (7.32) au Chapitre 7) et de la fréquence de fragmentation f_{br} (cf. (7.17) au Chapitre 7) pour chacune des trois sections. A noter qu'il ne s'agit pas ici de grandeurs réellement intégrées sur la section (lesquelles sont bien calculées dans le code lorsque c'est nécessaire). Elles sont évaluées, uniquement à des fins de post-traitement, pour une seule taille donnée [6], ce qui suffit à fournir une information pertinente ici. On constate ainsi que la fragmentation concerne majoritairement les gouttes de plus grande taille (sections 2 et 3) qui présentent les nombres de Weber les plus importants.

5. Ce terme source concerne à la fois les solveurs CHARME et SPIREE, il aurait donc eu sa place dans le paragraphe précédent. Cependant, il est archivé à l'intérieur du solveur SPIREE, et il n'est donc pas possible pour l'instant de présenter des champs moyens pour ce terme.

6. En l'occurrence le dernier point de quadrature utilisé pour le calcul de l'intégrale numérique, c'est-à-dire en pratique une valeur proche de la borne supérieure de la section.

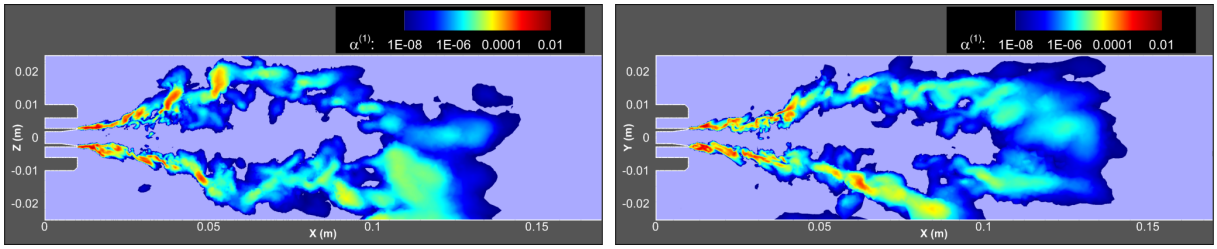


FIGURE 11.20 – *Fraction volumique de la section 1.*

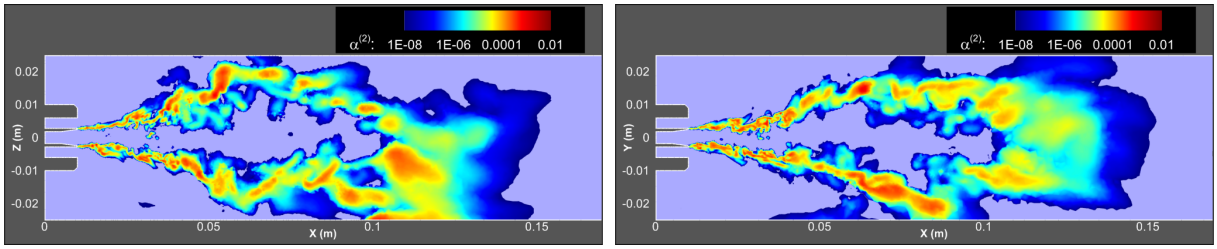


FIGURE 11.21 – *Fraction volumique de la section 2.*

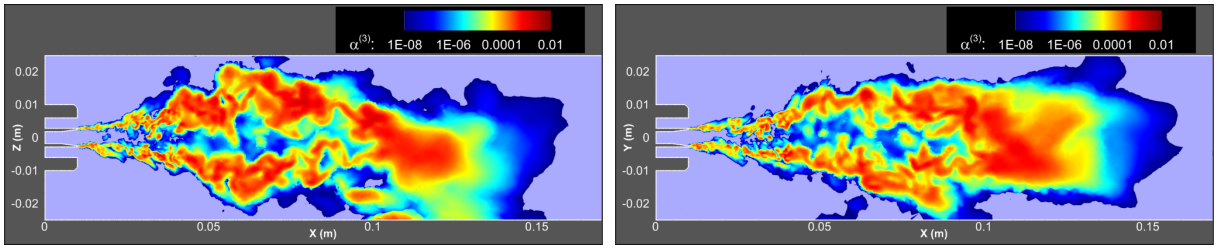


FIGURE 11.22 – *Fraction volumique de la section 3.*

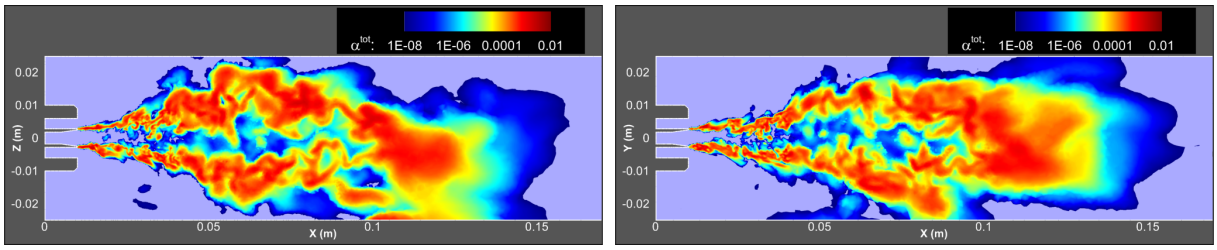


FIGURE 11.23 – *Fraction volumique totale.*

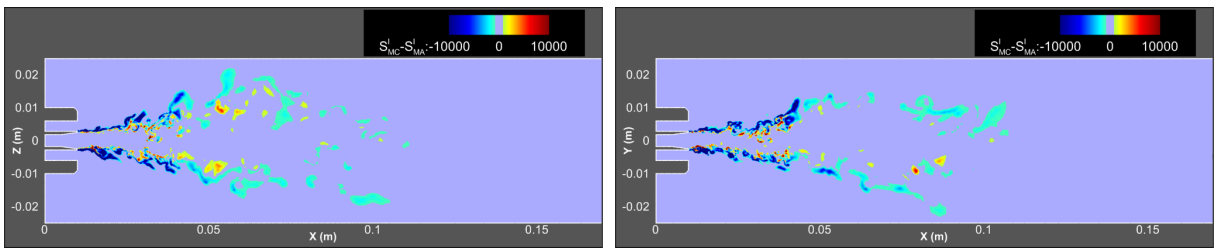


FIGURE 11.24 – *Terme source de transfert liquide-liquide* $S^l_M = S^l_{M_C} - S^l_{M_A}$.

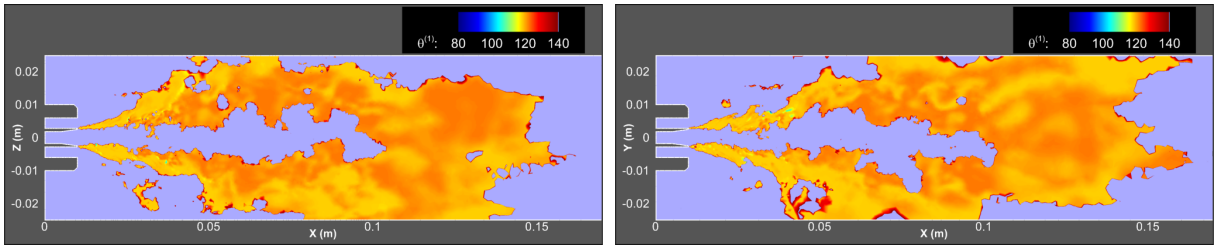


FIGURE 11.25 – *Température de la section 1.*

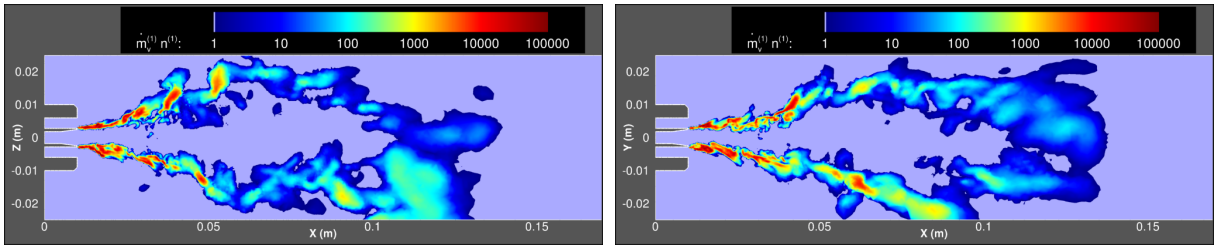


FIGURE 11.26 – *Débit d'évaporation de la section 1.*

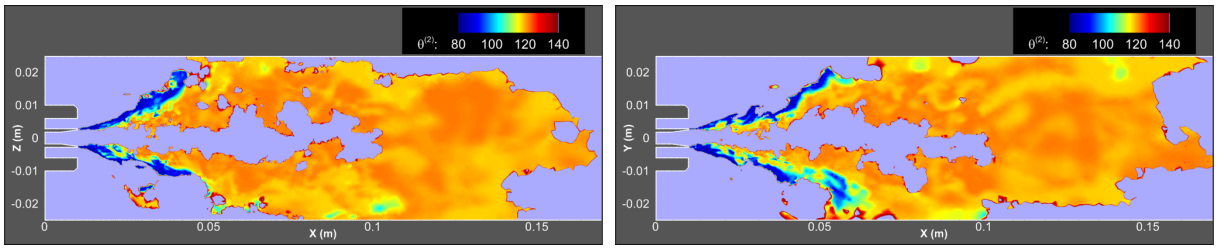


FIGURE 11.27 – *Température de la section 2.*

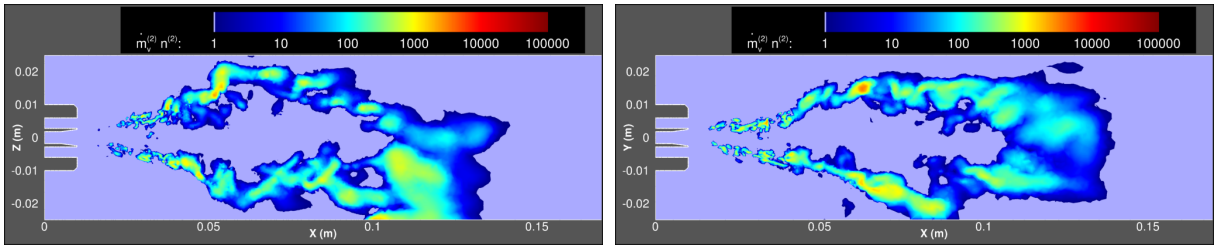


FIGURE 11.28 – *Débit d'évaporation de la section 2.*

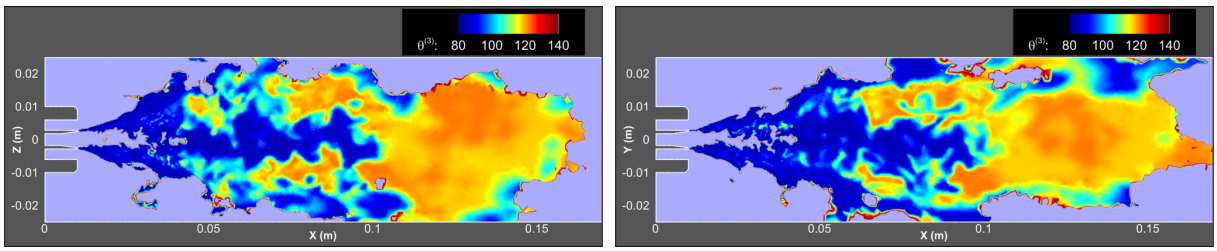


FIGURE 11.29 – *Température de la section 3.*

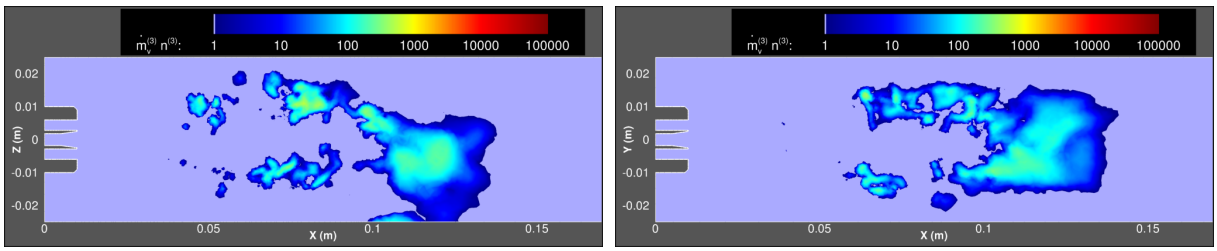


FIGURE 11.30 – *Débit d'évaporation de la section 3.*

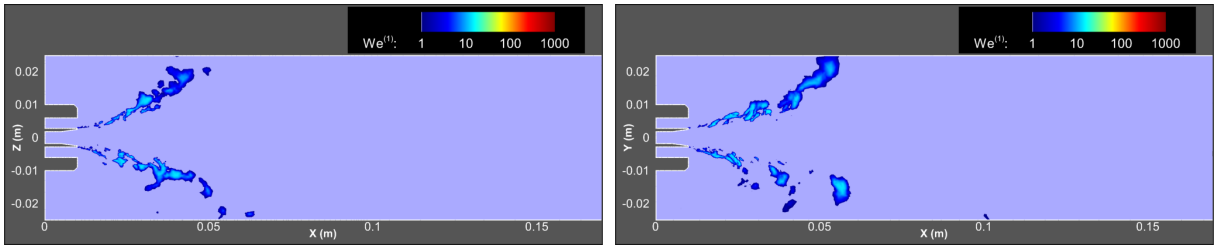


FIGURE 11.31 – *Nombre de Weber de la section 1.*

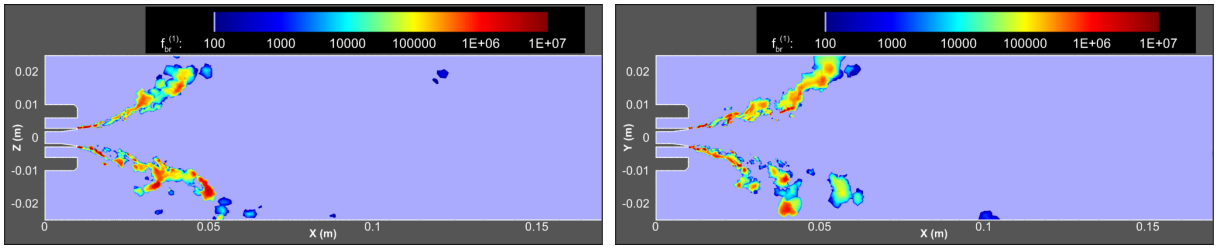


FIGURE 11.32 – *Fréquence de fragmentation de la section 1.*

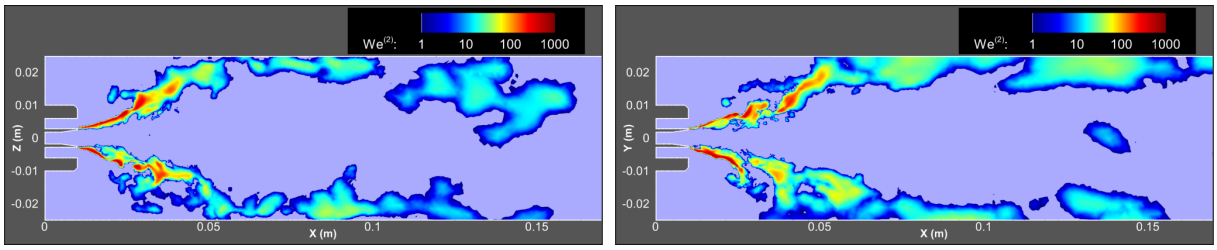


FIGURE 11.33 – *Nombre de Weber de la section 2.*

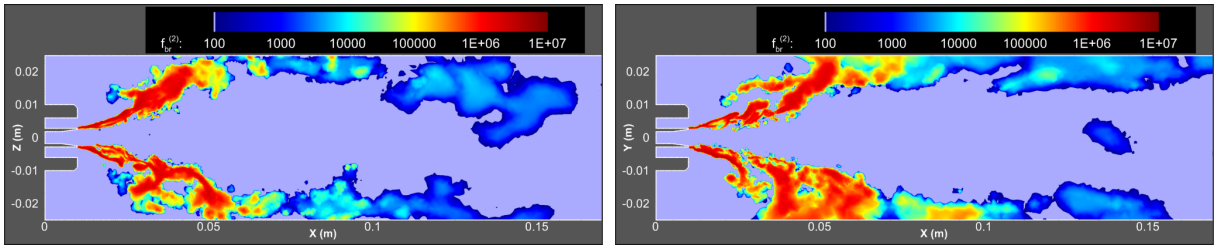


FIGURE 11.34 – *Fréquence de fragmentation de la section 2.*

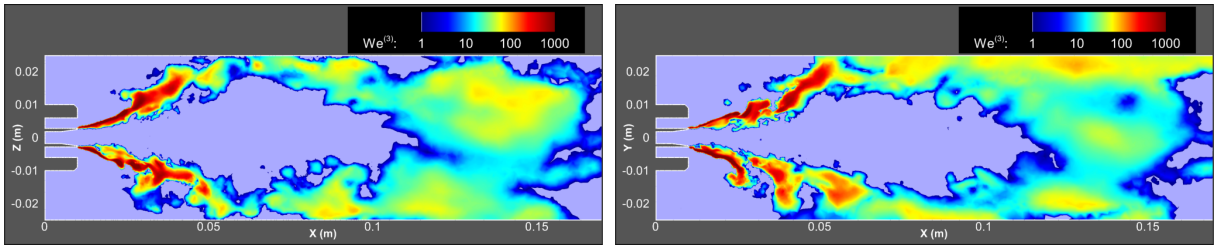


FIGURE 11.35 – *Nombre de Weber de la section 3.*

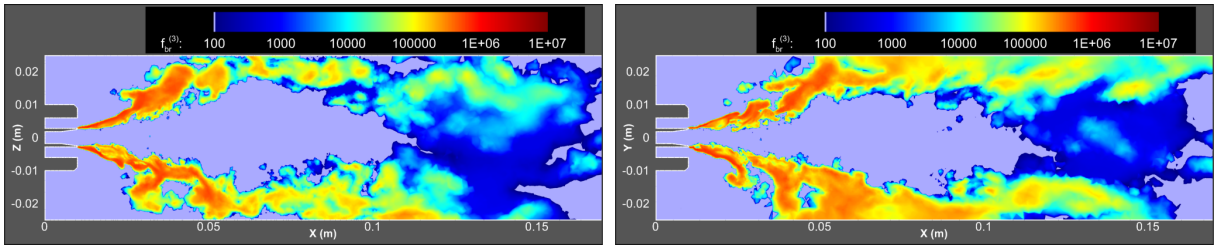


FIGURE 11.36 – *Fréquence de fragmentation de la section 3.*

11.6 Résultats relatifs aux distributions en taille et vitesse des gouttes

Comparaison simulation-expérience des diamètres moyens et vitesses moyennes de gouttes

Nous allons commencer par évaluer les diamètres moyens et vitesses moyennes des gouttes en six points particuliers de la géométrie, à partir des résultats de la simulation. La position de ces points est identique à celle des capteurs utilisés lors de la campagne d'essais menée sur le banc Mascotte par GICQUEL et al. [106], et qui a permis d'établir des distributions expérimentales des diamètres et vitesses de gouttes, ainsi que des valeurs moyennes. Ces six capteurs sont positionnés dans le plan (XY) médian ($Z = 0$). Leur position exacte est indiquée sur la Figure 11.37 et comparée au champ instantané de fraction volumique totale de la phase dispersée, à l'instant final $t = 17$ ms. Cette figure représente également la ligne le long de laquelle sera tracée l'évolution de la distribution en taille de gouttes au paragraphe suivant.

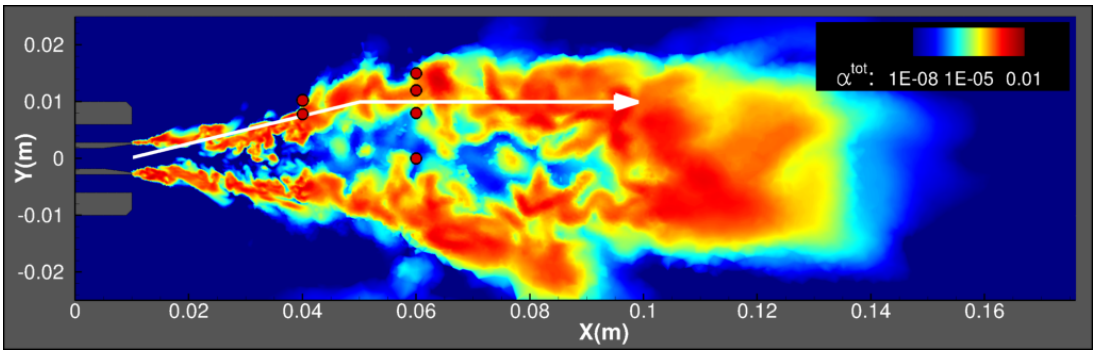


FIGURE 11.37 – ***Localisation des 6 capteurs pour comparaison avec les données expérimentales de GICQUEL et al. [106], représentation de la ligne pour le tracé des distributions en taille, et visualisation du champ de fraction volumique totale à l'instant final $t = 17$ ms.***

Afin de calculer des grandeurs moyennes, la méthodologie suivante est employée. En l'état actuel, les fichiers de résultats issus du calcul CEDRE fournissent uniquement l'évolution temporelle des valeurs moyennes du diamètre, de la vitesse, de la température et de la fraction volumique ***par section***, et pour chaque capteur. Les diamètres moyens étant reliés à la fraction volumique et à la densité en nombre de gouttes de chaque section, il s'agit donc de diamètres moyens de type D_{30} (voir la relation (3.70) au Chapitre 3), tels que :

$$D_{30}^{(k)} = \left(\frac{6\alpha^{(k)}}{\pi\, n^{(k)}} \right)^{1/3} . \tag{11.3}$$

Le diamètre moyen global, toutes sections confondues, s'exprime

$$D_{30} = \left(\frac{6\alpha^{TOT}}{\pi\, n^{TOT}} \right)^{1/3} , \tag{11.4}$$

avec

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \alpha^{TOT} & = & \displaystyle\sum_{k=1}^{N_s} \alpha^{(k)} \\ n^{TOT} & = & \displaystyle\sum_{k=1}^{N_s} n^{(k)} \quad = \quad \sum_{k=1}^{N_s} \frac{6\alpha^{(k)}}{\pi\, {D_{30}}^{(k)^3}} \end{array} \right. . \tag{11.5}$$

Il peut donc être exprimé uniquement en fonction des diamètres moyens et des fractions volumiques de chaque section. En un point $\boldsymbol{x}$ donné et à l'instant t, nous avons ainsi la relation suivante :

$$\boxed{ D_{30}(\boldsymbol{x}, t) = \left(\sum_{k=1}^{N_s} \alpha^{(k)} \right)^{1/3} \left(\sum_{k=1}^{N_s} \frac{\alpha^{(k)}}{{D_{30}}^{(k)^3}} \right)^{-1/3} } . \tag{11.6}$$

Ce faisant, il est possible de tracer l'évolution temporelle de ce diamètre moyen pour chaque capteur (cf. Figure 11.38). Il reste ensuite à obtenir une valeur moyennée dans le temps, notée $\overline{D_{30}}(\boldsymbol{x})$, par exemple sur la période $T = [13, 17]$ ms déjà utilisée pour le calcul des champs moyens en § 11.4. Le pas de temps d'intégration étant quasiment constant, une moyenne arithmétique est bien adaptée, et l'on a ainsi

$$\overline{D_{30}}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{N_{ite}} \sum_{i=1}^{N_{ite}} D_{30}(\boldsymbol{x}, t_i) \approx \frac{1}{T} \int_T D_{30}(\boldsymbol{x}, t)\, \mathrm{d}t \, , \tag{11.7}$$

N_{ite} désignant le nombre d'itérations du calcul dans la période T, et t_i l'instant correspondant à chaque itération. Les diamètres moyens ainsi calculés en chaque capteur sont reportés dans le Tableau 11.2 et comparés aux valeurs obtenues expérimentalement par GICQUEL et al. [106] [7].

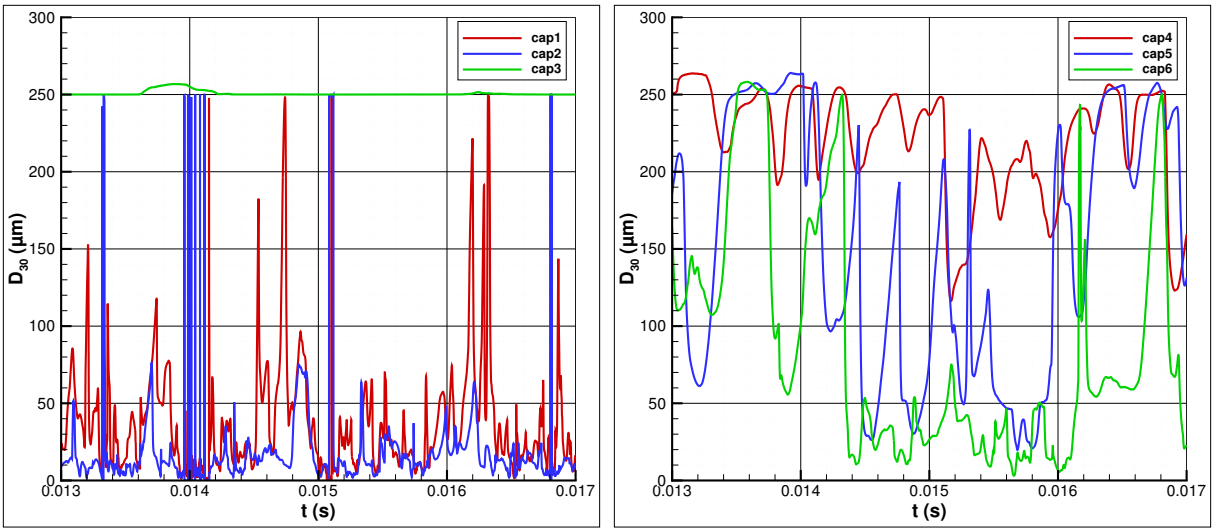


FIGURE 11.38 – ***Évolution temporelle du D_{30} en chacun des 6 capteurs.***

capteur	position (x, y) en mm	$\overline{D_{30}}$ calcul (µm)	$\overline{D_{30}}$ expérience (µm)	$\|\|\boldsymbol{v}\|\|$ calcul (m/s)	$\|\|\boldsymbol{v}\|\|$ expérience (m/s)
1	(40,8)	50.9	89.9	16.8	10.2 (4.0)
2	(40,10)	42.8	68.2	18.0	11.9 (4.3)
3	(60,0)	250.7	163.9	15.7	4.8 (1.9)
4	(60,8)	221.7	139.5	12.8	5.2 (2.1)
5	(60,12)	154.2	124.1	13.2	6.3 (2.7)
6	(60,15)	101.3	133.9	14.4	6.1 (2.8)

TABLEAU 11.2 – ***Comparaison simulation-expérience des diamètres moyens et vitesses moyennes en 6 capteurs.***

De manière analogue, il est possible de calculer pour chaque capteur une valeur moyenne de la vitesse des gouttes (en norme), toutes sections confondues. Pour cela, on pondère la vitesse moyenne de chaque section par la fraction volumique et l'on obtient ainsi :

$$\|\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x},t)\| = \left(\sum_{k=1}^{N_s} \alpha^{(k)} \|\boldsymbol{v}^{(k)}\|\right)\left(\sum_{k=1}^{N_s} \alpha^{(k)}\right)^{-1} . \tag{11.8}$$

La Figure 11.39 représente l'évolution temporelle de la vitesse moyenne des gouttes pour les six capteurs. Des valeurs moyennées dans le temps sont ensuite obtenues pour chaque capteur, reportées dans le Tableau 11.2 et comparées aux valeurs moyennes obtenues expérimentalement. A noter que les valeurs entre parenthèses dans le tableau correspondent aux écarts-types autour des valeurs moyennes expérimentales.

Par ailleurs, précisons qu'il est nécessaire d'exclure du calcul des valeurs moyennes les éventuels instants où les volumes de contrôle sont vides de particules. Pour une comparaison pertinente avec l'expérience, il est également souhaitable d'exclure du calcul les valeurs de diamètre trop faibles pour avoir été observées expérimentalement. D'après GICQUEL et al. [106], la valeur minimale des diamètres mesurés semble valoir environ 15 µm. Les instants où le diamètre moyen est inférieur à cette valeur n'ont donc pas été pris en compte dans le calcul des valeurs moyennes reportées dans le Tableau 11.2.

Les résultats reportés dans le Tableau 11.2, la Figure 11.38 et la Figure 11.39 appellent quelques remarques. Tout d'abord, on note que le diamètre moyen obtenu par la simulation au capteur numéro 3 est quasiment égal

7. Les positions des capteurs indiquées dans le Tableau 11.2 sont celles du calcul, avec une origine de l'axe X située en fond de chambre et non en sortie de l'injecteur, comme c'est le cas dans le rapport de GICQUEL et al. [106], d'où un décalage de 10 mm.

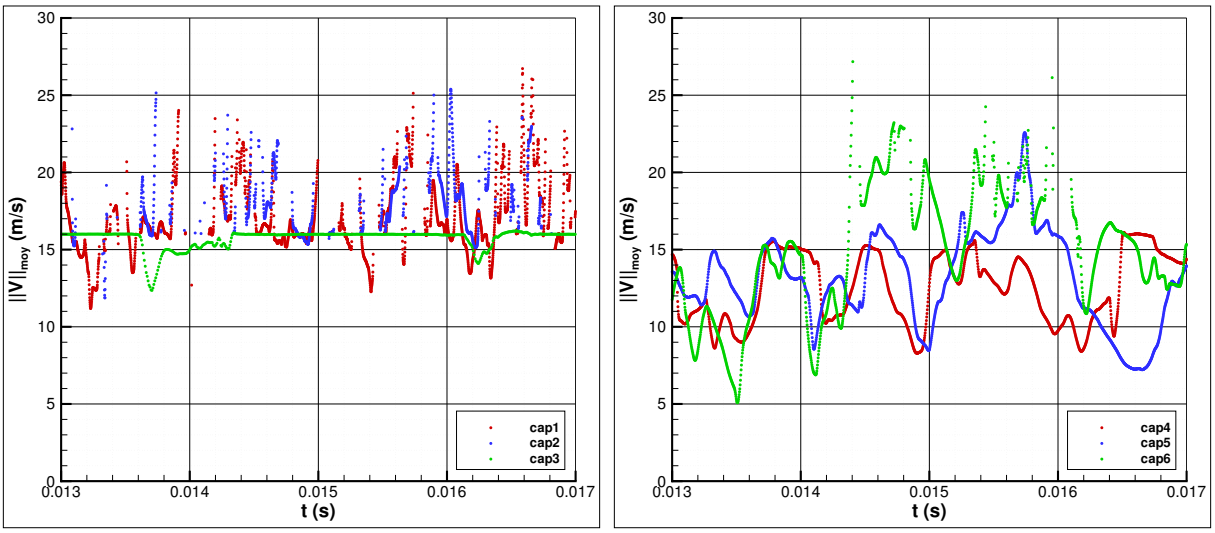


FIGURE 11.39 – *Évolution temporelle (dans la période de prise de moyenne) des vitesses moyennes des gouttes sur les 6 capteurs.*

au diamètre D_{ato} = 250 µm fixé par le modèle au moment du transfert entre les solveurs CHARME et SPIREE (cf. § 10.2.3). Ce capteur étant situé sur l'axe de symétrie (Y = 0), manifestement dans la zone de production des gouttes (cf. Figure 11.37), ce résultat est assez cohérent. D'ailleurs, les données expérimentales indiquent également un diamètre moyen de gouttes maximal en ce capteur. En revanche, la valeur expérimentale (D_{30} = 163.9 µm) est inférieure à la valeur donnée par le calcul, ce qui semble confirmer que la valeur postulée de D_{ato} = 250 µm est sur-estimée, en tout cas pour un diamètre moyen de type D_{30}. En ce qui concerne les autres capteurs, la comparaison n'est pas meilleure et les valeurs numériques peuvent être supérieures aux valeurs expérimentales (capteurs numéros 4 et 5) ou inférieures (capteurs numéros 1, 2 et 6). En toute rigueur, il conviendra cependant de poursuivre les simulations avant d'extraire des valeurs numériques suffisamment pertinentes pour pouvoir être réellement comparées à l'expérience. Les valeurs moyennes numériques ont été ici calculées sur une période de 4 ms quand la durée d'acquisition des données expérimentales est de l'ordre de la seconde (GICQUEL et al. [106]).

Ensuite, il apparait que la vitesse moyenne des gouttes est légèrement sur-estimée, d'autant plus à proximité de l'axe de symétrie et lorsque l'on s'éloigne en aval de l'injecteur (capteurs numéros 3 à 6). On voit ici la limite évidente d'imposer une unique vitesse pour les gouttes atomisées, la valeur postulée de 16 m/s étant probablement plus adaptée à des gouttes créées à proximité immédiate de la sortie de l'injecteur, là où l'écoulement gazeux est le plus rapide. Encore une fois, ce point de la modélisation pourrait être sensiblement amélioré par l'utilisation d'un modèle à 7 équations. Celui-ci permettrait en effet de conserver l'information sur la vitesse propre de chacune des deux phases lorsque celles-ci se retrouvent mélangées à l'échelle de sous-maille. Sous réserve d'une modélisation pertinente des termes de relaxation des vitesses, il serait donc possible de fournir une valeur beaucoup plus précise de la vitesse initiale des gouttes atomisées. Des solutions plus abordables bien que moins précises sont probablement envisageables. On pourrait ainsi imaginer agrémenter le modèle à 4 équations, actuellement mis en œuvre par le solveur CHARME, d'un modèle algébrique exprimant la vitesse locale de la phase liquide dans les mailles de mélange en fonction du gradient de vitesse du fluide (modèles dits "à flux de dérive"), entre autres possibilités (voir les perspectives évoquées dans la Conclusion).

Évolution spatiale de la distribution en taille de gouttes

Nous allons représenter dans ce paragraphe quelques distributions locales en taille de gouttes, tracées le long de la ligne représentée sur la Figure 11.37 à l'instant final t = 17 ms. Avant cela, il convient de préciser la définition exacte des fonctions de distribution dans l'approche sectionnelle avec reconstruction affine (voir l'Annexe B pour une présentation plus générale des méthodes sectionnelles). Cette approche a été développée récemment par SIBRA et al. [252] et intégrée au solveur SPIREE de CEDRE dans le cadre de la thèse de SIBRA [251]. Dans cette méthode, les distributions sont exprimées en la ***variable surface*** notée S, à ne pas confondre avec la notation s utilisée dans l'Annexe B pour désigner une variable taille quelconque (diamètre, rayon, surface ou volume). Pour chaque section

$I_s^{(k)} = [S_{k-1}, S_k[$, la densité en nombre de gouttes au point $\boldsymbol{x}$ et à l'instant t s'exprime

$$\overline{n}^{(k)}(t,\boldsymbol{x},S) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad S \in \left[S_{k-1}, S_a^{(k)}\right] \bigcup \left[S_b^{(k)}, S_k\right[\\ a^{(k)} + \left(b^{(k)} - a^{(k)}\right) \dfrac{S - S_a^{(k)}}{S_b^{(k)} - S_a^{(k)}} & \text{si} \quad S \in \left]S_a^{(k)}, S_b^{(k)}\right[\end{cases} . \tag{11.9}$$

Trois cas de figure peuvent ainsi être rencontrés au sein d'une section (cf. Figure 11.40), et la reconstruction affine utilise finalement quatre paramètres fonctions du temps et de l'espace :

- $S_a^{(k)}(t,\boldsymbol{x})$ et $S_b^{(k)}(t,\boldsymbol{x})$ sont des bornes "auxiliaires" de la section k, délimitant l'éventuel sous-intervalle sur lequel la distribution est non-nulle.
- $a^{(k)}(t,\boldsymbol{x})$ et $b^{(k)}(t,\boldsymbol{x})$ sont les coefficients de la reconstruction affine proprement dits.

Dans tous les cas, nous avons

$$S_{k-1} \leq S_a^{(k)}(t,\boldsymbol{x}) < S_b^{(k)}(t,\boldsymbol{x}) \leq S_k \, , \tag{11.10}$$

en rappelant que S_{k-1} et S_k sont les bornes "réelles" de la section, indépendantes du temps et de l'espace, et en pratique fixées par l'utilisateur du code de calcul. Cette définition de la reconstruction affine à quatre paramètres permet de respecter les conditions de réalisabilité (voir le paragraphe § B.4.3 de l'Annexe B) et offre une relative simplicité dans l'évaluation de certaines intégrales en permettant parfois des calculs analytiques (SIBRA [251]).

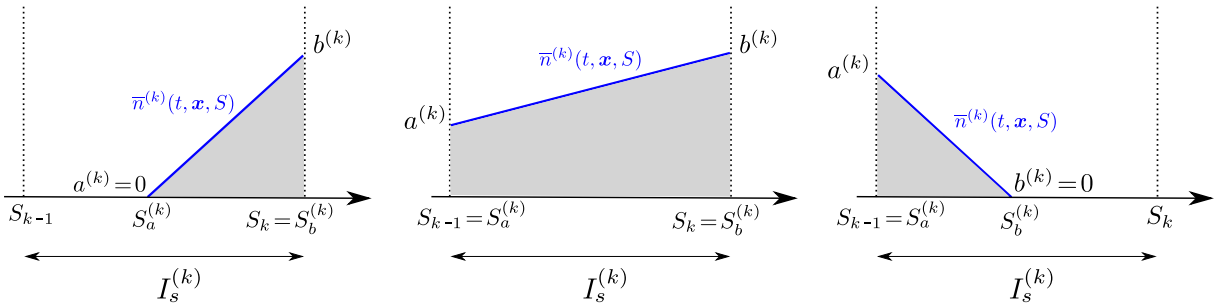


FIGURE 11.40 – ***Reconstruction sectionnelle affine en variable surface : trois configurations possibles dans une section d'après*** **SIBRA** ***[251].***

Cette définition étant précisée, nous représentons sur les Figure 11.41, Figure 11.42, Figure 11.43, Figure 11.44, Figure 11.45 et Figure 11.46 l'évolution de la distribution des diamètres le long d'une ligne tracée dans le plan (XY) (cf. Figure 11.37), à l'instant final $t = 17$ ms. Sur chaque figure, sont indiquées les cordonnées X et Y du point considéré et l'abscisse curviligne s le long de la ligne, l'origine $s = 0$ étant située au niveau de la sortie de l'injecteur. Sont également indiqués les diamètres moyens D_{10}, D_{20}, D_{30}, D_{32} et D_{43}, dont la définition générale est donnée par la relation (3.70) du Chapitre 3. En pratique, il existe des expressions analytiques permettant de calculer ces diamètres moyens directement à partir des paramètres de la reconstruction affine dans chaque section.

De plus, on notera que si les distributions sont affines en variable surface, elles ne le sont évidemment plus en variable diamètre comme on peut l'observer sur les figures (d'autant plus que l'échelle est logarithmique). Par ailleurs, l'expression de la densité en nombre de gouttes exprimée en la variable diamètre s'obtient en fonction de son homologue en variable surface grâce à la relation

$$\overline{n}^{(k)}(t,\boldsymbol{x},S)\,\mathrm{d}s = \overline{n}^{(k)}(t,\boldsymbol{x},D)\,\mathrm{d}D \, . \tag{11.11}$$

Ainsi, puisque $S = \pi D^2$, il vient

$$\overline{n}^{(k)}(t,\boldsymbol{x},D) = 2\pi D\,\overline{n}^{(k)}(t,\boldsymbol{x},S) \, . \tag{11.12}$$

L'évolution de la distribution en taille est intéressante. Celle-ci est d'abord nulle sur la Figure 11.41 gauche, en accord avec une localisation en plein cœur du dard liquide. Puis elle révèle ensuite une faible population de gouttes sur la Figure 11.41 droite, étroitement distribuée dans la troisième section, et très proche de la valeur initiale des gouttes créées par atomisation. A cet endroit nous sommes encore très proches de la sortie de l'injecteur (cf. Figure 11.37), manifestement sur le bord de l'interface diffuse, précisément dans la zone de transfert par atomisation primaire entre les solveurs CHARME et SPIREE. A mesure que l'on s'éloigne de l'injecteur, la distribution des diamètres de gouttes évolue ensuite vers une répartition plus ou moins équilibrée des différentes sections, le peuplement des sections inférieures étant provoqué à la fois par la fragmentation secondaire et par l'évaporation. On remarque également une forte disparité dans la forme de la distribution, qui peut être relativement amodale (cf. Figure 11.44 droite), monomodale (cf. Figure 11.42), ou même bimodale (cf. Figure 11.44 gauche), justifiant a posteriori l'intérêt de l'approche sectionnelle et de la description continue par morceaux de la distribution en taille.

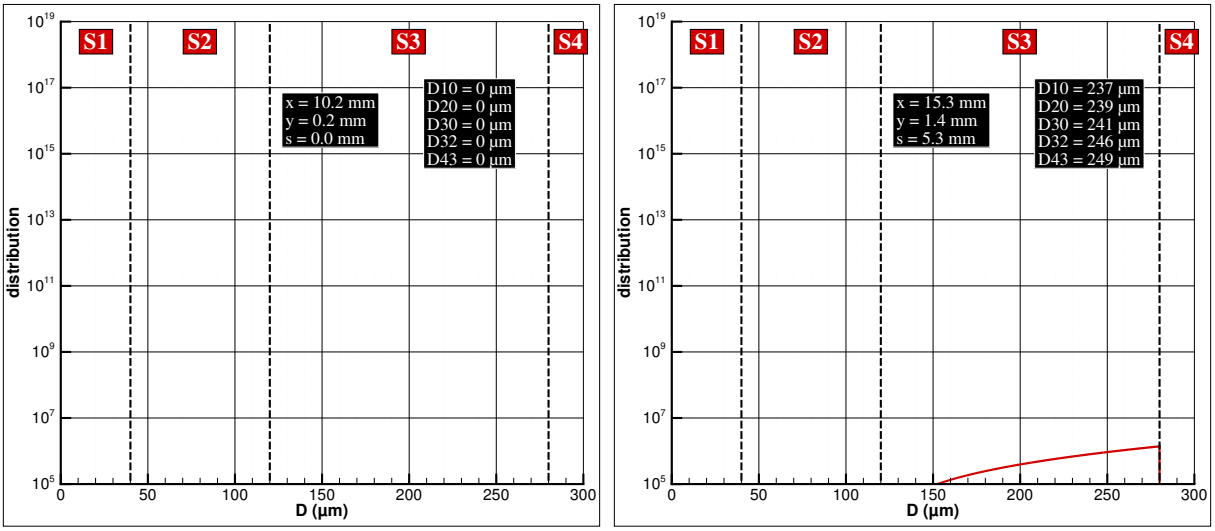


FIGURE 11.41 – *Distributions des diamètres de gouttes le long de la ligne tracée sur la Figure 11.37, à t = 17 ms (1/6).*

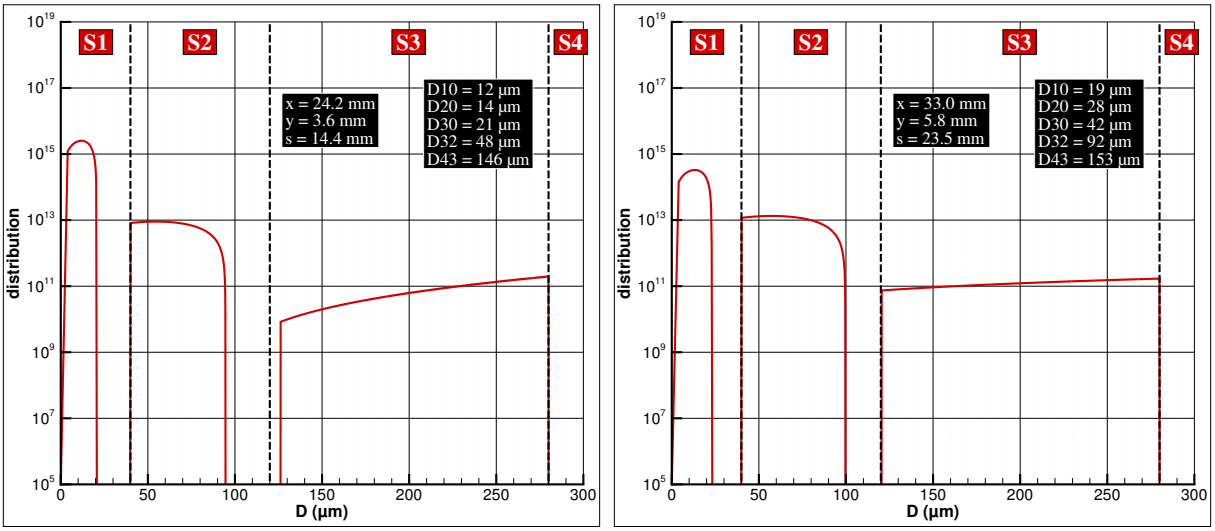


FIGURE 11.42 – *Distributions des diamètres de gouttes le long de la ligne tracée sur la Figure 11.37, à t = 17 ms (2/6).*

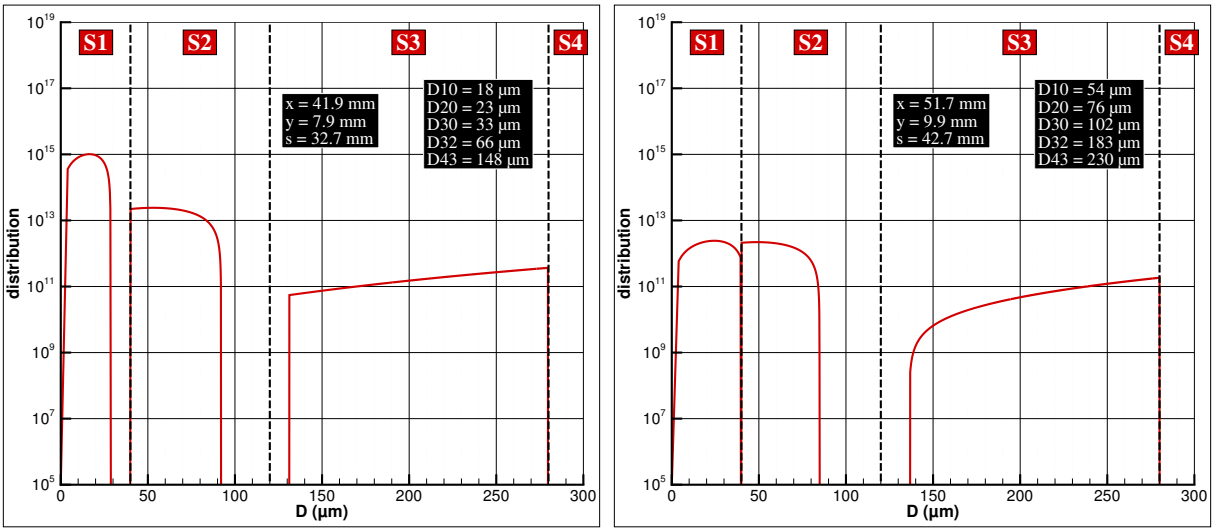


FIGURE 11.43 – *Distributions des diamètres de gouttes le long de la ligne tracée sur la Figure 11.37, à t = 17 ms (3/6).*

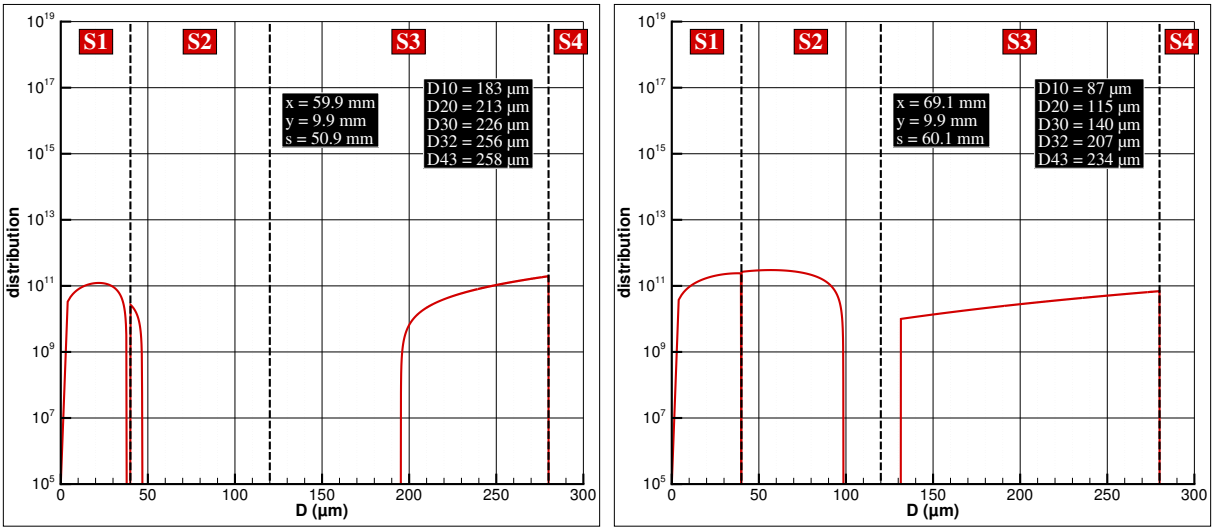


FIGURE 11.44 – *Distributions des diamètres de gouttes le long de la ligne tracée sur la Figure 11.37, à t = 17 ms (4/6).*

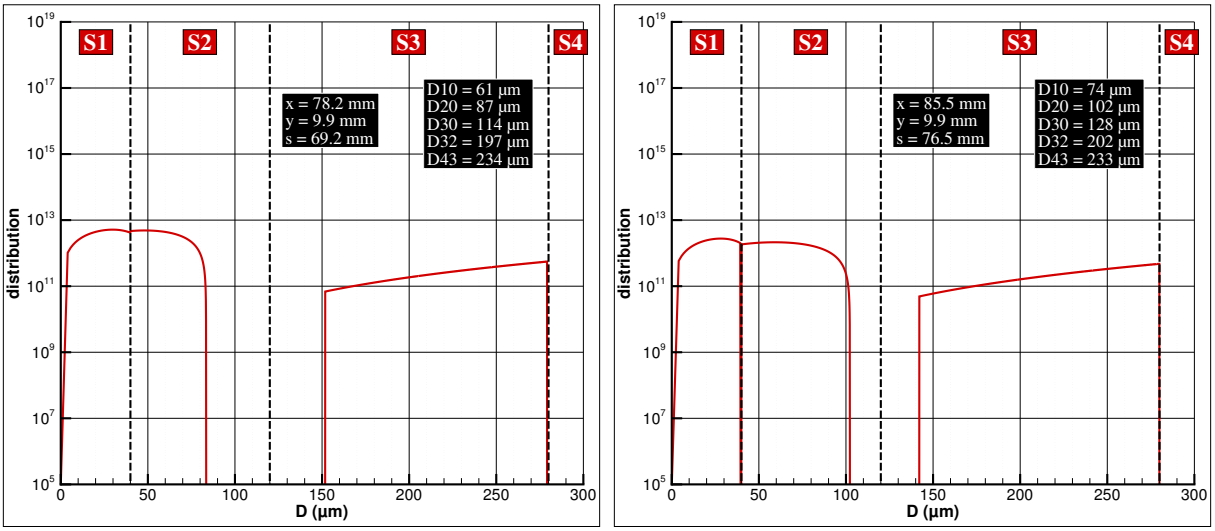


FIGURE 11.45 – *Distributions des diamètres de gouttes le long de la ligne tracée sur la Figure 11.37, à t = 17 ms (5/6).*

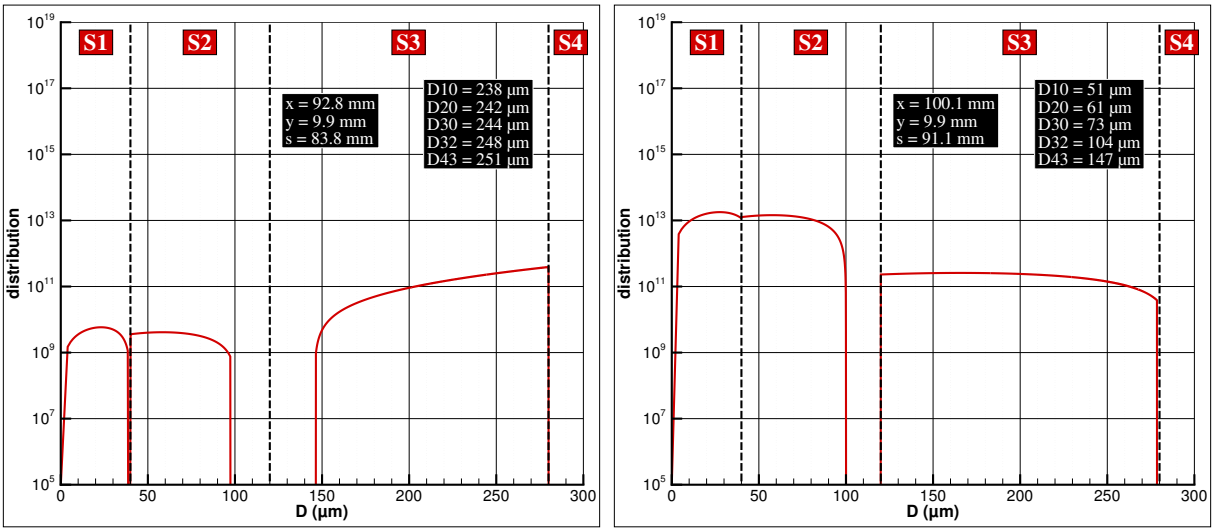


FIGURE 11.46 – *Distributions des diamètres de gouttes le long de la ligne tracée sur la Figure 11.37, à t = 17 ms (6/6).*

11.7 Mise en évidence et analyse élémentaire des oscillations de pression

Ce paragraphe présente un début d'analyse des oscillations de pression qui surviennent au cours la simulation. La Figure 11.47 représente le signal de pression obtenu en un capteur situé dans le fond arrière de la chambre, précisément au point $(X, Y, Z) = (350, 0, 0)$ mm. L'évolution est représentée pour la durée totale du calcul et un zoom est également fait sur la fin du calcul. Il est manifeste que le signal de pression présente un caractère oscillatoire, à tendance polychromatique et manifestement selon un régime encore très transitoire. L'analyse par densité spectrale de puissance (DSP) présentée sur la Figure 11.48 n'a donc pas encore une pertinence majeure, d'autant plus que la structure de l'oscillation de pression évolue ensuite fortement, l'amplitude des différents modes étant en constante évolution. Simplement, il est intéressant de remarquer que la fréquence la plus excitée s'établit, dans la fenêtre choisie, aux alentours de $f = 1760$ Hz, et qu'une deuxième fréquence notable est observée autour de $f = 6960$ Hz (avec une amplitude relative de -13 dB par rapport à la fréquence principale). Une analyse rapide semble montrer qu'il s'agit des fréquences du premier et du quatrième mode longitudinal, respectivement notées f_{1L} et f_{4L}, et dont les valeurs approximatives peuvent être calculées par les relations

$$f_{1L} = \frac{\overline{c}}{2L} , \tag{11.13}$$

et

$$f_{4L} = 4 f_{1L} = \frac{2\overline{c}}{L} . \tag{11.14}$$

Ici, avec une longueur de chambre jusqu'à l'entrée de la tuyère de $L = 468$ mm, et une vitesse du son moyenne dans cette période d'environ $\overline{c} = 1755$ m/s, nous obtenons en effet

$$f_{1L} = 1875 \text{ Hz} , \qquad f_{4L} = 7500 \text{ Hz} . \tag{11.15}$$

Évidemment, un calcul plus précis pourrait être réalisé en mettant en œuvre un solveur d'Helmholtz appliqué à la géométrie exacte de la chambre Mascotte, et utilisant un champ hétérogène de vitesse du son issu de la simulation. Il faut également noter que l'analyse d'une oscillation de pression dans un régime transitoire est assez discutable dans la mesure où la pression moyenne n'est pas stabilisée et que le champ de vitesse du son est en évolution permanente, en même temps que la répartition des gaz de combustion.

Par ailleurs, les Figure 11.49 et Figure 11.50 représentent l'évolution du champ de pression instantanée dans le plan (XY) entre les instants $t = 13,07$ et $t = 13,64$ ms (délimités par le rectangle bleu sur la Figure 11.47). Ainsi, il est possible de visualiser le passage de l'onde de pression longitudinale, mais également des inhomogénéités de pression qui apparaissent à la fois dans l'injecteur et immédiatement en aval de celui-ci, et qui sont certainement couplées d'une manière ou d'une autre avec l'onde de pression longitudinale. Ces zones localisées de dépression ou de surpression sont probablement d'origines différentes :

- les ondes de pression dans l'injecteur (à la fois d'oxygène liquide et d'hydrogène gazeux) pourraient être dues au mode de condition aux limites. On impose en effet un débit massique constant sur ces limites. Il est possible que relaxer cette contrainte en imposant plutôt une pression génératrice soit préférable.
- les inhomogénéités localisées sur l'axe de symétrie, dans la zone de mélange diphasique immédiatement à l'aval du dard liquide, pourraient être provoquées par un couplage physique mais une incidence numérique n'est a priori pas à exclure non plus. C'est en effet typiquement dans cette zone que sont susceptibles de survenir les oscillations de pression "numériques" induites par le gradient de température et le mélange diphasique dans le modèle à 4 équations (voir l'Annexe D pour une analyse détaillée). S'il s'avérait que les inhomogénéités de pression dans cette zone étaient effectivement d'origine numérique, cela constituerait encore une justification supplémentaire pour adopter une modélisation plus poussée que l'approche à fluide homogène.
- en revanche, les inhomogénéités qui paraissent distribuées le long d'un cone issu de l'injecteur sont probablement uniquement d'origine physique. En effet, l'écoulement est purement gazeux dans cette région et par conséquent l'origine numérique évoquée précédemment est à exclure. Différents scénarios sont envisageables pour expliquer leur origine : phénomène hydrodynamique (détachement tourbillonnaire provenant de la couche de cisaillement), couplage avec le dégagement de chaleur (instabilités de combustion et critère de Rayleigh), couplage avec l'atomisation primaire ou encore avec l'évaporation des gouttes.

Avant de poursuivre l'analyse de ces oscillations de pression, il conviendra de poursuivre les calculs pour atteindre un régime stationnaire et éventuellement un régime d'oscillation stabilisé.

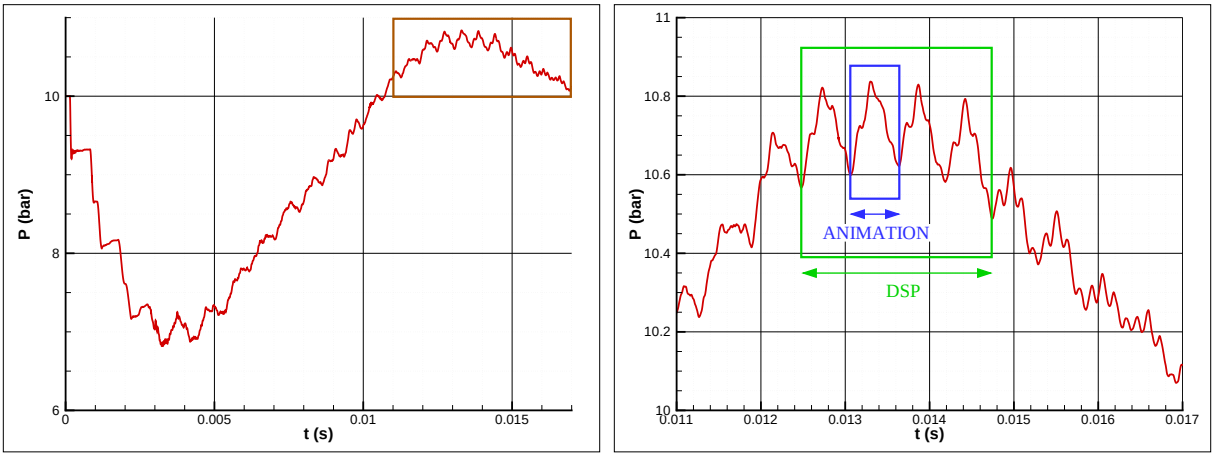


FIGURE 11.47 – *Évolution temporelle de la pression du fluide au point* $(X, Y, Z) = (350, 0, 0)$ *mm.*

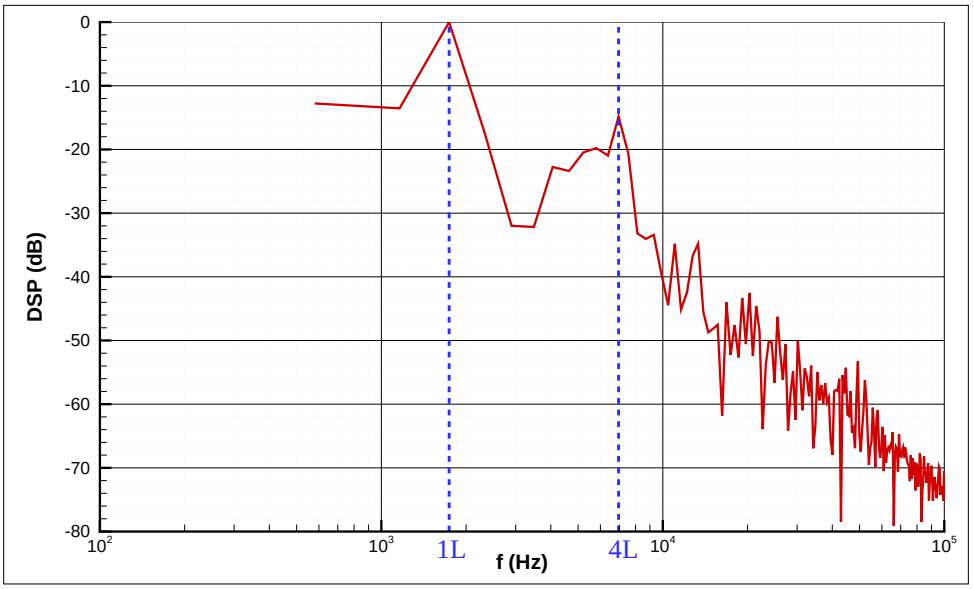


FIGURE 11.48 – *Densité spectrale de puissance (dB) du signal de pression au point* $(X, Y, Z) = (350, 0, 0)$ *mm. Fenêtre rectangulaire entre* $t = 12,48$ *et* $t = 14,74$ *ms (4 périodes).*

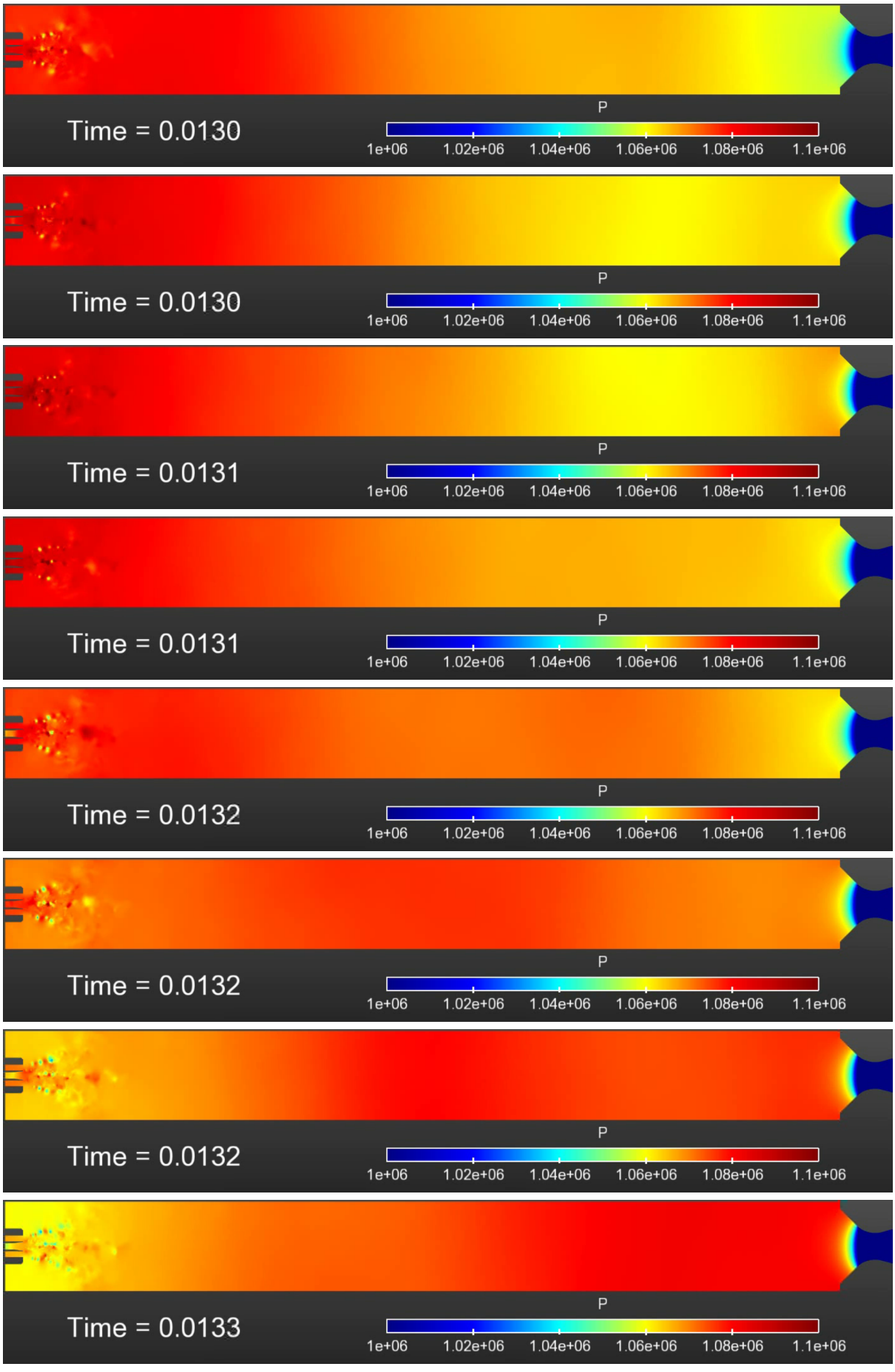


FIGURE 11.49 – ***Évolution du champ de pression instantanée dans le plan*** (XY)**.**

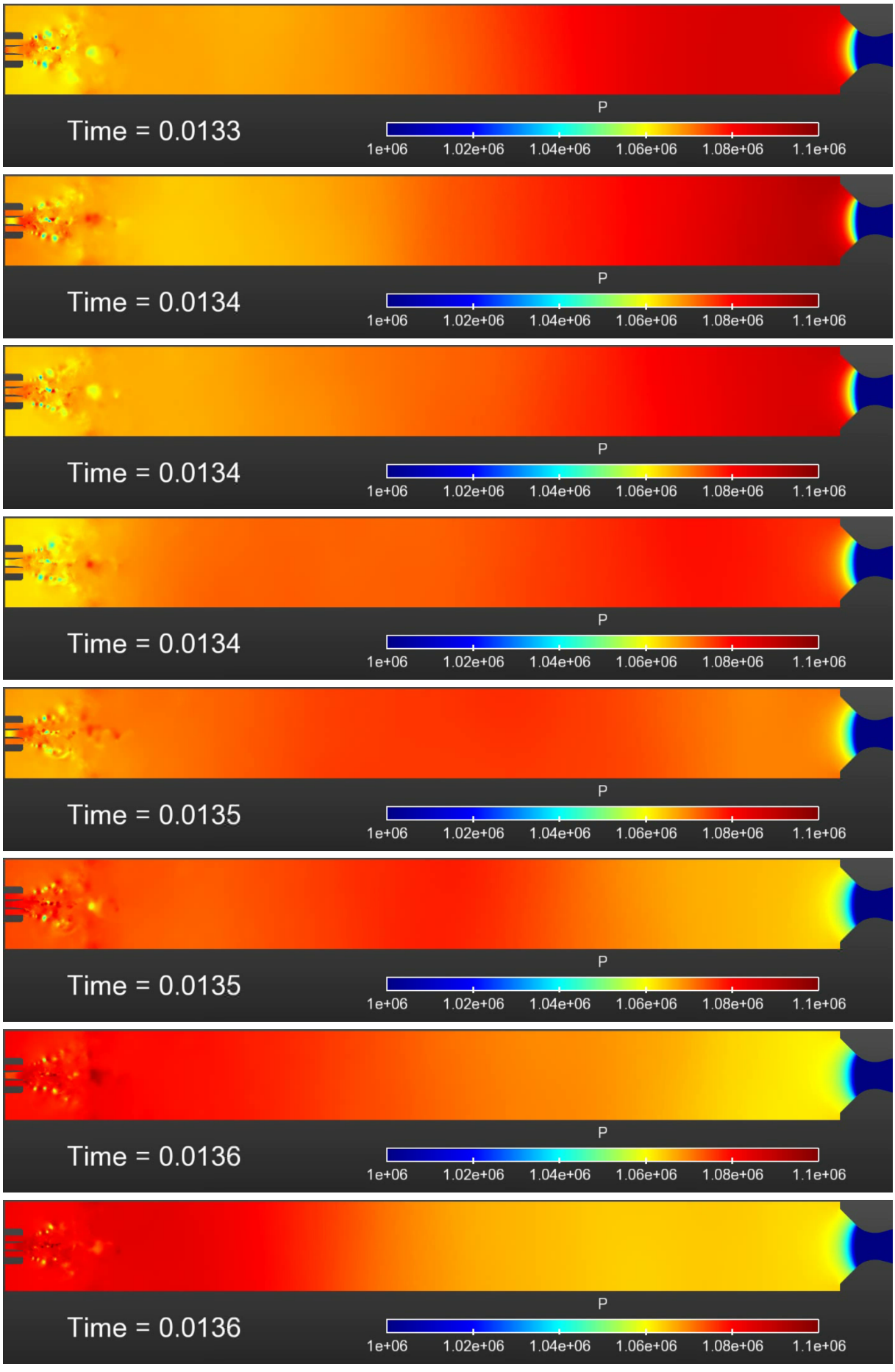


FIGURE 11.50 – ***Évolution du champ de pression instantanée dans le plan*** (XY)**.**

11.8 Visualisations qualitatives

Pour terminer, quelques visualisations qualitatives sont présentées dans ce paragraphe. La Figure 11.51 compare tout d'abord une iso-surface de fraction massique d'oxygène liquide (valeur $Y_l = 0,95$) issue de la simulation, à une photographie expérimentale obtenue par FDIDA et al. [95]. La même échelle est utilisée et l'on visualise une fenêtre rectangulaire d'une largeur de 26 mm positionnée immédiatement à la sortie de l'injecteur. Cette comparaison met en évidence l'écart entre la finesse des plus petites structures liquides visibles dans l'expérience et les structures que l'on est effectivement capable de capter par la simulation. Toutefois, étant donné le coût déjà très élevé du calcul réalisé ici avec pourtant une résolution de maillage encore modeste (moins de 10 millions d'éléments), il est clair qu'un premier objectif raisonnable devra consister à améliorer les temps de retour des calculs avant de réaliser des simulations sur des maillages plus fins. Plusieurs pistes sont envisagées en ce sens et évoquées plus en détail dans la conclusion de ce manuscrit, parmi lesquelles une augmentation de la puissance du calcul mais également une optimisation possible du code et des modèles.

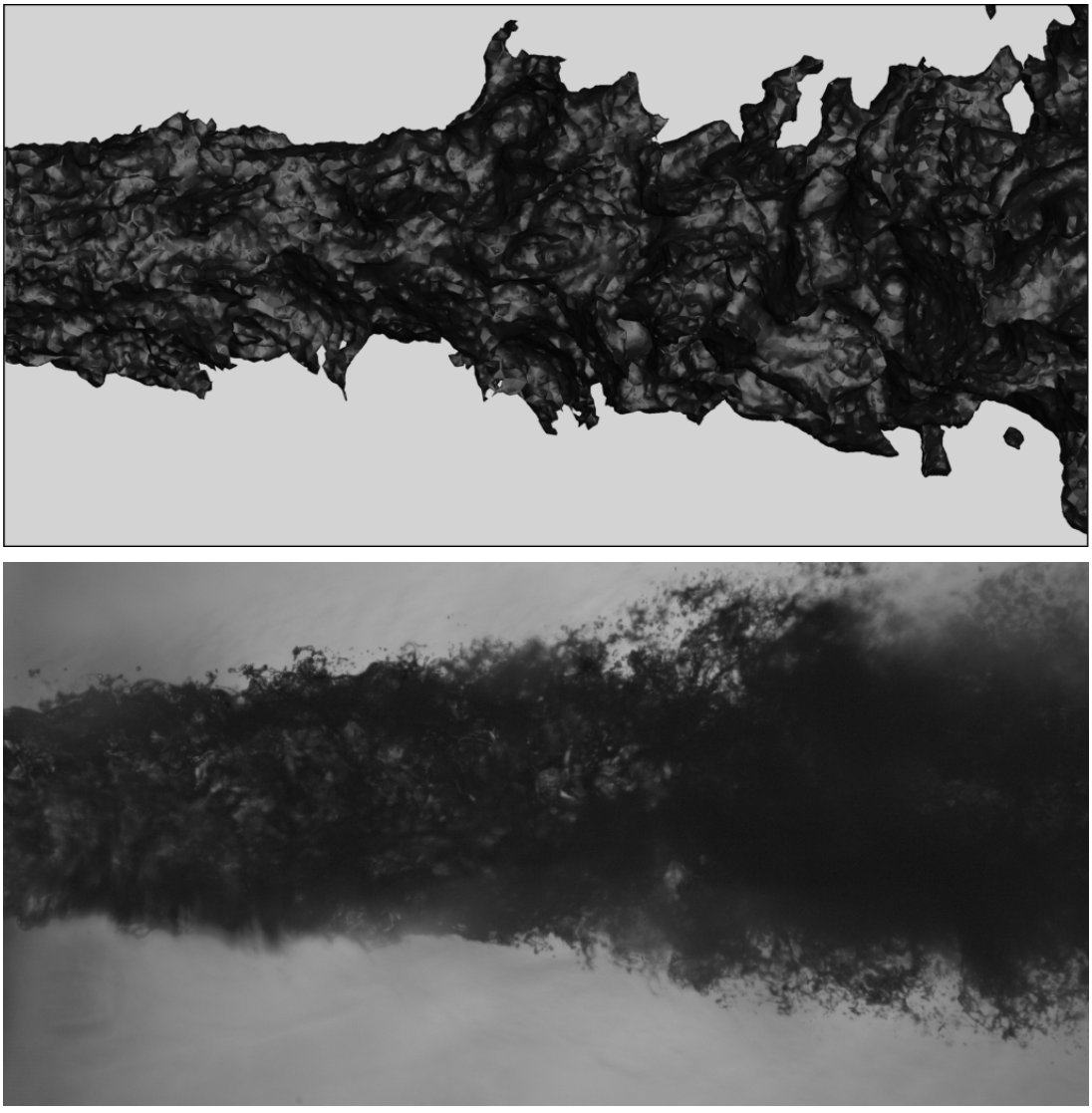


FIGURE 11.51 – ***Comparaison entre une iso-surface de fraction massique d'oxygène liquide (valeur $Y_l = 0,95$) issue de la simulation et une photographie expérimentale obtenue par FDIDA et al. [95].***

Enfin, les Figure 11.52 et Figure 11.53 regroupent une succession d'images représentant l'évolution du dard liquide (iso-surface de fraction volumique de liquide dans CHARME, colorée en bleu et définie par la valeur $\alpha_l = 0,99$) et celle de la température du fluide CHARME en "volume rendering". Il est ainsi possible d'observer le développement du dard liquide et les instabilités qui naissent à sa surface. Celles-ci conduisent à la rupture de fragments liquides à son extrémité, ce qui correspond à l'établissement d'une longueur limite de dard liquide comme identifié sur la Figure 11.6.

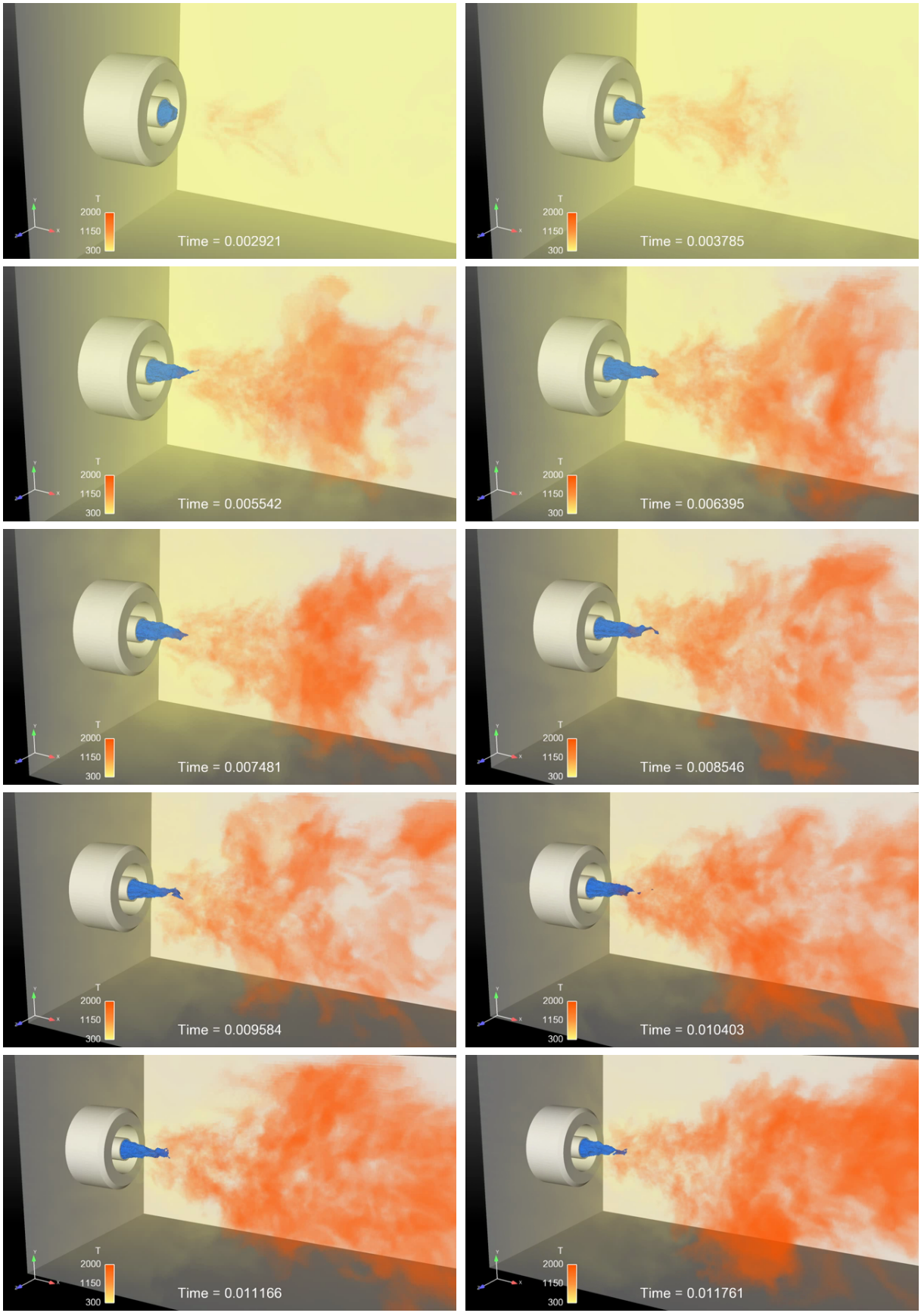


FIGURE 11.52 – *Représentation du dard liquide (iso-surface $\alpha_l = 0,99$) et du champ de température (volume rendering) au cours du temps (1/2).*

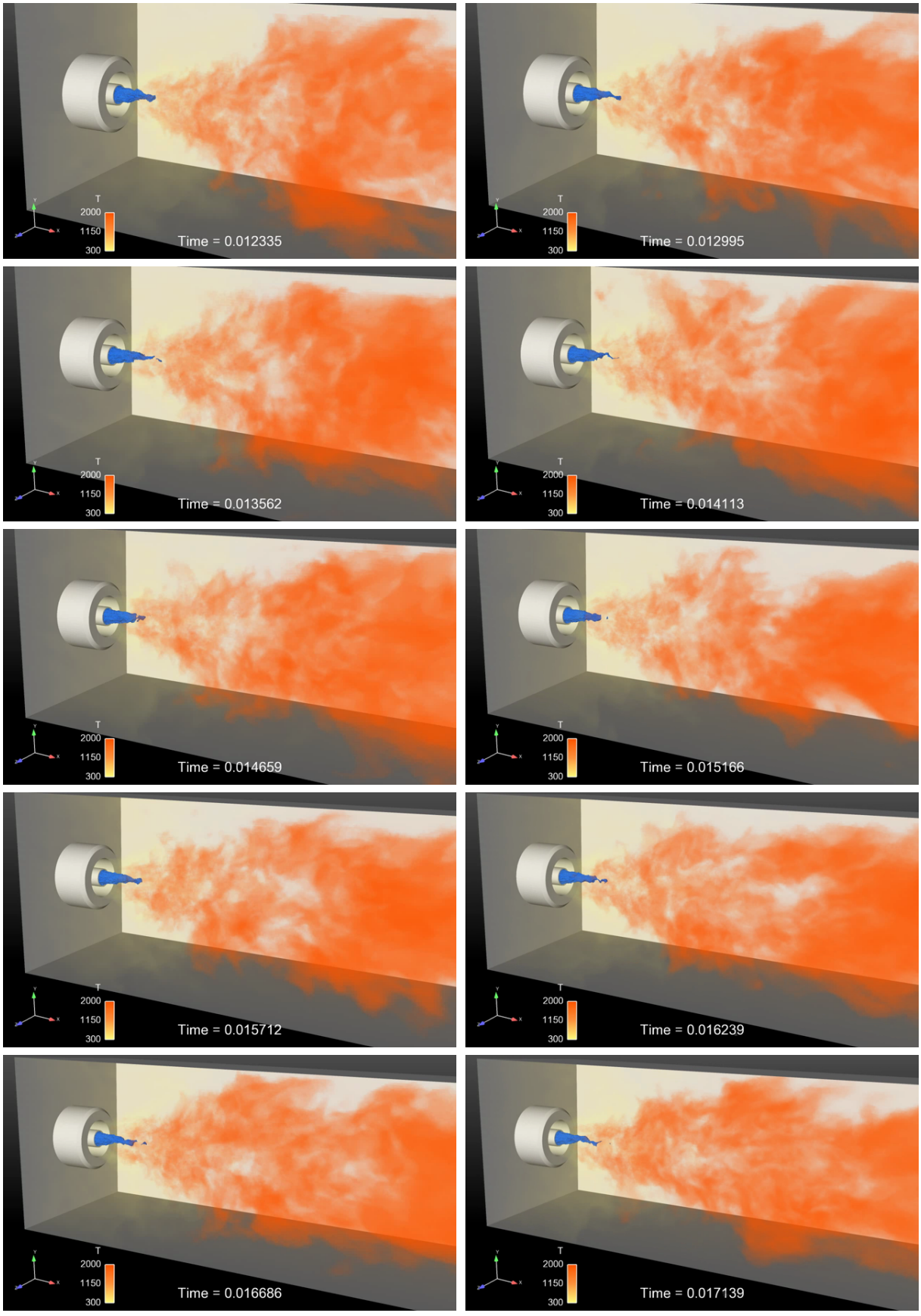


FIGURE 11.53 – *Représentation du dard liquide (iso-surface $\alpha_l = 0,99$) et du champ de température (volume rendering) au cours du temps (2/2).*

Conclusion

Les travaux présentés dans cette thèse visaient à ***mettre en place une stratégie de couplage entre des modèles d'écoulement diphasique à phases séparées et à phase dispersée***. Le principal objectif résidait dans l'amélioration de la description des écoulements diphasiques issus de l'atomisation des jets liquides en environnement réactif, en particulier au sein des moteurs-fusées cryotechniques. En parallèle, les travaux ont également contribué au développement d'une plateforme logicielle multi-physique dédiée au domaine de l'énergétique, en l'occurrence le ***code CEDRE*** développé par l'ONERA. Pour atteindre cet objectif, la démarche suivie a consisté à mettre en œuvre un couplage eulérien-eulérien entre un modèle à ***interface diffuse*** de type ***fluide homogène*** ou ***4 équations***, utilisé pour décrire l'écoulement diphasique à ***phase séparées*** (écoulement gazeux réactif et jet d'oxygène liquide dense), et un ***modèle cinétique eulérien*** basé sur une ***approche sectionnelle*** pour décrire l'écoulement à ***phase dispersée***. L'ensemble des modèles physiques et des méthodes numériques développés dans le cadre de cette thèse ont été intégrés aux solveurs CHARME et SPIREE du code CEDRE.

Après avoir rappelé, dans la Partie I, le contexte et les problématiques de la propulsion cryotechnique et proposé une revue bibliographique sur l'atomisation des jets liquides, nous avons présenté dans la Partie II les détails de la stratégie mise en œuvre dans cette thèse, en précisant les équations sous-jacentes aux solveurs utilisés, ainsi que les modèles physiques et les méthodes numériques retenus. Ce faisant, cette Partie II a également permis de mettre en lumière des besoins en méthodes numériques et en modèles physiques nouveaux. Ceux-ci ont été développés dans le cadre de ces travaux de thèse et ont donc spécifiquement fait l'objet de la Partie III. Une nouvelle méthode d'interpolation MUSCL multipente pour maillages non structurés généraux a ainsi été développée et présentée au Chapitre 9. Elle a permis d'améliorer la robustesse et la précision des schémas de discrétisation spatiale d'ordre 2 de CEDRE, notamment en présence d'écoulements diphasiques. Nous avons ensuite présenté au Chapitre 10 le modèle de couplage "liquide-liquide" développé entre les solveurs CHARME et SPIREE afin de décrire l'atomisation primaire. Une première mise en œuvre et validation élémentaire de ce modèle a été apportée dans ce chapitre, avant que l'ensemble de la stratégie ne soit appliquée à la simulation 3D LES du banc Mascotte en conditions réactives au Chapitre 11. Bien que le temps physique calculé par la simulation actuelle ne soit pas suffisant pour obtenir une LES convergée en moyenne, les résultats obtenus ont permis de démontrer le bon comportement global de la stratégie mise en place et particulièrement des méthodes numériques et des modèles physiques développés.

A notre connaissance, c'est la première fois qu'est mise en œuvre une stratégie de couplage impliquant un modèle à interface diffuse et un modèle cinétique eulérien avec approche sectionnelle pour décrire l'atomisation primaire, qui plus est dans un contexte d'écoulement réactif. Ces travaux de thèse laissent donc augurer des perspectives intéressantes en ce qui concerne la simulation instationnaire LES de l'atomisation des jets liquides en général, et pour le domaine de la combustion cryotechnique en particulier. Néanmoins, il existe encore de nombreuses pistes d'améliorations de la stratégie actuelle, dont certaines sont discutées ci-dessous.

Perspectives futures de développement

1. Une première piste d'amélioration réside dans une ***meilleure prise en compte de la turbulence***. En effet, la modélisation du fluide CHARME intègre en l'état actuel une approche implicite de la turbulence (cf. Chapitre 5). La dissipation de l'énergie turbulente à l'échelle de sous-maille est supposée être contenue dans la dissipation induite par les schémas numériques, et n'est donc pas prise en compte de manière explicite par des termes adéquats dans les équations. Cela constitue indéniablement une piste d'amélioration, autant qu'un sujet à aborder avec précaution. En effet, si plusieurs modèles de sous-maille pour la LES sont disponibles dans CEDRE, leur validité rigoureuse dans le cas d'écoulements diphasiques compressibles devra être discutée et évaluée avec soin, comme semblent l'indiquer les récents travaux de Chesnel et al. [40–42] sur

le sujet. Cela est d'autant plus vrai si la modélisation du fluide devait s'orienter vers un système plus évolué comme le modèle à 7 équations, pour lequel la fermeture des termes turbulents dans un contexte LES est un sujet encore peu développé. Par ailleurs, au-delà de la seule modélisation du fluide, l'impact de la turbulence sur l'atomisation primaire, et donc la façon dont elle est prise en compte dans le modèle de couplage, mériterait également d'être étudiée plus en détail. Enfin, l'effet de la turbulence de la phase gazeuse sur la phase dispersée est également un point à étudier, aucun modèle de dispersion turbulente des gouttes n'étant intégré à SPIREE à l'heure actuelle.

2. ***Les propriétés des gouttes créées par atomisation primaire*** devront pouvoir être modélisées. En l'état actuel, on postule ***a priori*** des valeurs moyennes uniques pour le diamètre, la vitesse et la température des gouttes atomisées (cf. Chapitre 10). Sur la base de la hiérarchie proposée en § 10.2.3, une première amélioration consisterait tout d'abord à postuler a minima ***des distributions*** en taille, voire en vitesse, plutôt que de simples valeurs moyennes. Dans un second temps, une amélioration plus importante consisterait à prédire ces distributions de manière dynamique, sur la base des propriétés locales et instantanées de l'écoulement. Pour cela, plusieurs pistes peuvent être envisagées. En premier lieu, il est clair que l'utilisation d'un ***modèle à 7 équations*** pour décrire le fluide faciliterait la modélisation dans la mesure où celui-ci fournirait localement une pression, mais surtout une vitesse et une température propres à chaque phase. Dans les volumes de contrôle où le transfert entre solveurs est susceptible d'avoir lieu, la vitesse et la température de la phase liquide fourniraient alors de bonnes conditions initiales aux gouttes, évidemment sous réserve d'une modélisation adaptée des termes de relaxation entre phases. De plus, disposer d'une température propre à chaque phase permettra également de s'affranchir de l'hypothèse d'une phase liquide isotherme, et résoudra par la même occasion les problèmes d'oscillations de pression inhérentes à la fermeture thermodynamique du modèle à 4 équations (cf. Annexe D).

   En ce qui concerne le diamètre des gouttes, l'ajout d'une ***équation pour la densité d'aire interfaciale*** serait probablement très utile, encore une fois sous réserve d'une modélisation pertinente des termes sources de cette équation. La littérature sur le sujet étant assez fournie (cf. § 3.3.3), le travail de modélisation devrait être relativement limité sur ce point. Par ailleurs, cette équation sur la densité d'aire interfaciale trouverait autant son utilité dans le cadre de la modélisation actuelle en fluide homogène que dans celle à 7 équations. Les ingrédients disponibles pour la modélisation des termes sources ne seraient simplement pas les mêmes.

   Enfin, si l'on souhaitait développer une modélisation pour la vitesse des gouttes atomisées sans mettre en œuvre un modèle à 7 équations, que ce soit par exemple en conservant le formalisme LHF actuel ou encore en développant un ***modèle à 5 équations*** (deux températures mais toujours une seule vitesse moyenne), plusieurs pistes pourraient être imaginées. La plus réaliste étant probablement celle d'une reconstruction locale de la vitesse de la phase liquide par un modèle de type "flux de dérive", tel que celui employé par JAY [148]. Dans ce modèle, le différentiel de vitesse local est reconstruit à partir de la fraction volumique et de son gradient, et d'un coefficient de diffusion basé sur une épaisseur de couche de cisaillement. Une autre piste, plus incertaine et inspirée des méthodes à suivi d'interface développées notamment par TRYGGVASON et al. [270], pourrait consister en un transport lagrangien de quelques particules fluides caractérisant la phase liquide depuis l'injection. Celles-ci pourraient alors éventuellement fournir l'information de vitesse nécessaire au modèle d'atomisation primaire.

3. La ***validation des modèles et de la stratégie numérique de couplage*** est à poursuivre. Il sera notamment nécessaire d'étudier précisément l'effet des constantes apparaissant dans les termes sources, et de s'assurer d'une convergence en maillage des simulations (selon un ou des critère(s) restant à définir). Nous avons pu vérifier au Chapitre 10 le bon comportement des modèles sur un maillage beaucoup plus fin que celui utilisé pour la simulation complète du Chapitre 11, mais évidemment cela ne constitue pas encore une démonstration de la convergence en maillage. Par ailleurs, il sera également très intéressant de mettre en œuvre la stratégie de couplage sur des cas d'application différents, extérieurs au seul domaine de la combustion cryotechnique. On peut notamment penser à la combustion aérobie, que ce soit dans les moteurs à combustion interne automobiles ou les turboréacteurs aéronautiques, où l'atomisation primaire des carburants liquides joue également un rôle important.

4. Comme évoqué dans le Chapitre 11, ***l'adaptation de la stratégie numérique et des modèles à une approche moyennée de type RANS*** serait pertinente. Elle permettrait par exemple de réaliser des simulations instationnaires LES en régime établi, sur la base d'une solution moyenne obtenue plus rapidement en RANS. Pour y parvenir, il faudrait évidemment adapter les différents modèles, en particulier le modèle d'atomisation primaire mais également le modèle de combustion turbulente. Pour cela, l'ajout d'une équation sur la densité d'aire interfaciale serait encore une fois profitable, la très grande majorité des modèles développés dans la littérature pour les termes sources de cette équation ayant été pensée dans le cadre RANS. De plus, il faudrait également ajouter un modèle de dispersion turbulente des gouttes dans le solveur diphasique eulérien SPIREE. Enfin, il faudrait s'assurer que la transition entre les approches RANS et LES se déroule correctement, ce qui n'est pas forcément garanti.

5. Dans l'optique future d'étudier spécifiquement les instabilités de combustion et les oscillations de pression survenant dans les moteurs cryotechniques, il est possible qu'***une modification du mode d'injection des ergols*** dans les simulations soit nécessaire. En effet, dans la simulation actuelle présentée au Chapitre 11, les conditions limites d'injection des ergols imposent un débit massique constant. Il n'est pas exclu que ce mode d'injection favorise les ondes de pression observées ***dans l'injecteur d'oxygène***. Il serait intéressant de vérifier si une condition limite imposant une pression génératrice plutôt qu'un débit constant ne serait pas moins susceptible de générer ces oscillations, tout en étant par ailleurs plus physique.
6. Comme nous l'avons souligné au Chapitre 11, le temps physique calculé dans la simulation actuelle est somme toute assez court comparé à la consommation CPU. En l'occurrence, près de 950k heures CPU ont été nécessaires pour simuler 17 ms de temps physique. Même si les différents phénomènes physiques et les échelles caractéristiques impliquent des pas de temps faibles et que le nombre important de modèles mis en œuvre a évidemment un coût, il est clair qu'une diminution du temps de retour des simulations sera la bienvenue, que ce soit pour poursuivre la simulation actuelle sur un temps physique plus long, ou que ce soit pour réaliser ensuite des simulations avec une résolution de maillage plus importante. Au-delà de l'augmentation de la puissance de calcul, plusieurs pistes peuvent être menées en parallèle pour y parvenir :
   - ***réduction du nombre de sections*** décrivant la distribution en taille des gouttes. Quatre sections ont été utilisées dans la simulation actuelle, la quatrième ayant été ajoutée pour des raisons de robustesse des méthodes numériques d'inversion et en lien avec la borne infinie de la distribution. En résolvant ces problèmes numériques, cette quatrième section pourrait être supprimée et le temps de calcul réduit. En allant plus loin, on pourrait également évaluer dans quelle mesure conserver deux sections n'est pas suffisant pour décrire la distribution et les phénomènes propres aux gouttes.
   - ***optimisation du modèle de combustion turbulente***. En l'état actuel, le modèle de relaxation vers l'équilibre (MRE) procède, à chaque itération, à un calcul de l'équilibre chimique en chacune des mailles où la température est supérieure à la température d'inflammation (cf. § 7.3.3). Depuis la mise en place de la simulation, le modèle MRE a évolué dans CEDRE et intègre notamment la possibilité de tabuler préalablement le calcul de l'équilibre chimique. Ces calculs d'équilibre constituant une part non négligeable de la consommation CPU, l'utilisation de la tabulation apporterait probablement une économie en temps de calcul appréciable.
   - ***optimisations diverses du code et des solveurs***. Un certain nombre d'optimisations plus ou moins poussées sont certainement possibles. Un travail en ce sens est actuellement conduit dans CEDRE indépendamment de ces travaux de thèse et bénéficiera certainement aux futures simulations. En particulier, l'effort de calcul en diphasique est fortement inhomogène, un certain nombre de calculs de flux et de termes sources étant effectués seulement dans les régions de l'écoulement où cela est nécessaire. Par conséquent, l'équilibrage de la charge de calcul peut très certainement être optimisé dans des proportions importantes, notamment par des techniques du type "vol de tâches".
7. Enfin, d'un point de vue pratique, il serait intéressant d'***enrichir les résultats issus de CEDRE*** de manière à faciliter le post-traitement des simulations. Cela concerne principalement le solveur SPIREE, auquel il faudrait intégrer le calcul de champs moyens ainsi que des sorties donnant directement les diamètres moyens (D_{10}, D_{20}, D_{30}, D_{32}...) pour l'ensemble de la distribution.

Finalement, il est possible d'esquisser les contours de ce que pourrait être une version du code CEDRE la mieux adaptée possible à la simulation de l'atomisation primaire dans un contexte réactif. Si l'on s'en tient à une stratégie couplant des modèles à interfaces diffuses à des modèles cinétiques, cet outil pourrait ainsi être constitué de :

1. un ***modèle à 7 équations*** incluant une modélisation fine des termes de relaxation en pression (tension de surface), vitesse (frottement interfacial) et température (chauffage de la phase liquide et éventuellement évaporation), doté de schémas numériques robustes en maillages non structurés, et capitalisant sur la modélisation existante en monophasique (modèles de combustion turbulente, termes de diffusion). Ce modèle existe actuellement sous la forme d'un prototype plus ou moins indépendant de CEDRE, mais il devrait à terme y être totalement intégré sur la base du solveur CHARME.
2. un ***modèle cinétique pour la phase dispersée*** basé sur le solveur eulérien SPIREE, intégrant une modélisation fine des distributions en taille (méthode sectionnelle avec reconstruction affine déjà existante) et en vitesse (modèle Gaussien Anisotrope en cours de développement, cf. Chapitre 3), ainsi que des phénomènes physiques (évaporation, fragmentation et coalescence). Ce modèle serait couplé au modèle à 7 équations en suivant l'approche développée dans cette thèse, mais avec une modélisation des termes sources de couplage améliorée, d'une part par les informations supplémentaires fournies par le modèle à 7 équations en comparaison du modèle à 4 équations, et d'autre part grâce à l'ajout d'une équation sur la densité d'aire interfaciale. Les propriétés des gouttes créées au moment du transfert seraient prédites de manière dynamique

sous la forme de distributions. Pour cela, il sera probablement nécessaire de disposer d'informations supplémentaires pour décrire la dispersion initiale en taille de gouttes, la donnée conjointe de la densité d'aire interfaciale et de la fraction volumique de la phase liquide ne pouvant fournir qu'un seul diamètre moyen. Cette information supplémentaire pourrait prendre la forme d'une relation algébrique qui reste à définir, reliant la dispersion en taille au différentiel de vitesse ou à l'intensité de la turbulence, par exemple.

3. une ***équation modélisant l'évolution de la densité d'aire interfaciale***. En fournissant une information sur la topologie de l'interface en sous-maille, cette équation servirait à la fois à la modélisation des termes de relaxation du fluide, au terme source d'atomisation primaire et aux modèles décrivant les propriétés des gouttes créées.

Quatrième partie

Annexes

Annexe A

Établissement du modèle semi-cinétique avec propriétés thermodynamiques fonctions de la température

Le système semi-cinétique tel qu'il est présenté dans la littérature (Laurent et Massot [167]) est basé sur l'hypothèse d'une masse volumique et d'une capacité calorifique indépendantes de la température. La prise en compte explicite de la dépendance en température dès le niveau semi-cinétique fait apparaitre des termes supplémentaires, qui se répercutent au niveau macroscopique. A l'heure actuelle, ces termes ne sont pas intégrés dans le solveur SPIREE du code CEDRE, bien qu'il soit possible de définir des propriétés thermodynamiques fonctions de la température. A terme, l'implémentation de ces termes dans SPIREE est souhaitable pour mieux appréhender les cas où la température est fortement variable. C'est pourquoi nous nous efforçons dans cette annexe d'établir le système semi-cinétique en prenant en compte explicitement la dépendance en température des grandeurs thermodynamiques. Il faut donc bien garder à l'esprit que les termes supplémentaires mis en évidence ici sont négligés dans la version actuelle de SPIREE. Commençons par rappeler l'expression (3.43) de l'équation cinétique, régissant l'évolution de la NDF f dans l'espace des phases $(t, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}, s, \theta)$, t, $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{v}$, s et θ désignant respectivement le temps, la position, la vitesse, la taille et la température des particules :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_{\boldsymbol{x}} \cdot (\boldsymbol{v} f) + \nabla_{\boldsymbol{v}} \cdot (\mathcal{F} f) + \frac{\partial}{\partial s}(\mathcal{K} f) + \frac{\partial}{\partial \theta}(\mathcal{R} f) = \Gamma + Q \,. \tag{A.1}$$

La masse d'une particule $m(s, \theta)$ est introduite, de sorte que

$$m(s, \theta) = \rho_0(\theta)\tau(s) \,, \tag{A.2}$$

où $\rho_0(\theta)$ est la masse volumique thermodynamique de la particule, fonction de la température θ, et $\tau(s)$ est le volume de la particule uniquement fonction de sa taille s (diamètre, surface ou volume). Introduisons de plus l'énergie interne massique d'une particule, fonction uniquement de la température et de la capacité calorifique massique $c_p(\theta)$ (on néglige les effets de compressibilité) :

$$e(\theta) = c_p(\theta)\theta \,. \tag{A.3}$$

Comme expliqué en 3.4.3.1, l'établissement du modèle semi-cinétique implique de procéder aux opérations suivantes sur l'équation cinétique :

$$\begin{cases} \displaystyle\int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \text{Eq. (A.1)} \, \mathrm{d}\boldsymbol{v} \, \mathrm{d}\theta \\ \displaystyle\int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \text{Eq. (A.1)} \, m(s, \theta) \, \mathrm{d}\boldsymbol{v} \, \mathrm{d}\theta \\ \displaystyle\int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \text{Eq. (A.1)} \, m(s, \theta)\boldsymbol{v} \, \mathrm{d}\boldsymbol{v} \, \mathrm{d}\theta \\ \displaystyle\int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \text{Eq. (A.1)} \, m(s, \theta)e(\theta) \, \mathrm{d}\boldsymbol{v} \, \mathrm{d}\theta \end{cases} \tag{A.4}$$

Ces quatre étapes sont détaillées dans les paragraphes suivants. De plus, par souci de simplification d'écriture, les dépendances respectives des différentes variables seront écrites uniquement la première fois qu'elles apparaissent, exception faite éventuellement des termes qui nécessitent une attention particulière (masse, énergie interne, grandeurs thermodynamiques). Dans un premier temps, il est nécessaire de définir des grandeurs moyennes.

A.1 Définition de grandeurs moyennes

Commençons par rappeler la définition (3.49) de la densité en nombre de gouttes $\overline{n}(t, \boldsymbol{x}, s)$. Il s'agit de la moyenne au niveau semi-cinétique (après intégration sur les variables vitesse et température) de la NDF f :

$$\overline{n}(t, \boldsymbol{x}, s) = \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} f(t, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}, s, \theta) \, \mathrm{d}\boldsymbol{v} \, \mathrm{d}\theta \, . \tag{A.5}$$

On rappelle également l'hypothèse (3.48) faite sur la forme de la NDF :

$$f(t, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}, s, \theta) = \overline{n}(t, \boldsymbol{x}, s) \, \phi_{\boldsymbol{v}}(t, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}, s) \phi_\theta(t, \boldsymbol{x}, s, \theta) \, , \tag{A.6}$$

où $\phi_{\boldsymbol{v}}$ et ϕ_θ sont les distributions en vitesse et en température, conditionnées par la taille s. En multipliant la NDF f par la masse d'une particule $m(s, \theta)$, une densité de probabilité en masse, que l'on note f_M, peut être définie :

$$f_M(t, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}, s, \theta) = m(s, \theta) f(t, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}, s, \theta) \, . \tag{A.7}$$

En introduisant ensuite la densité en masse $\rho(t, \boldsymbol{x}, s, \theta) = m(s, \theta)\overline{n}(t, \boldsymbol{x}, s)$, il vient, en simplifiant l'écriture :

$$f_M = m\overline{n}\phi_{\boldsymbol{v}}\phi_\theta = \rho\phi_{\boldsymbol{v}}\phi_\theta \, . \tag{A.8}$$

On peut alors définir une masse volumique moyenne au niveau semi-cinétique $\overline{\rho}(t, \boldsymbol{x}, s)$, en intégrant la pdf massique sur l'espace des vitesse et des températures :

$$\overline{\rho}(t, \boldsymbol{x}, s) = \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} f_M \, d\boldsymbol{v} \, d\theta = \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m f \, d\boldsymbol{v} \, d\theta = \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \rho \, \phi_{\boldsymbol{v}}\phi_\theta \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \, . \tag{A.9}$$

Avec ces définitions, il est possible de définir deux moyennes différentes au niveau semi-cinétique pour une grandeur quelconque φ :

- une moyenne statistique :

$$\overline{\varphi}(t, \boldsymbol{x}, s) = \frac{1}{\overline{n}} \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \varphi f \, \mathrm{d}\boldsymbol{v} \, \mathrm{d}\theta = \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \varphi \, \phi_{\boldsymbol{v}}\phi_\theta \, \mathrm{d}\boldsymbol{v} \, \mathrm{d}\theta \, . \tag{A.10}$$

- une moyenne pondérée par la masse :

$$\widetilde{\varphi}(t, \boldsymbol{x}, s) = \frac{1}{\overline{\rho}} \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \varphi f_M \, \mathrm{d}\boldsymbol{v} \, \mathrm{d}\theta = \frac{1}{\overline{\rho}} \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \rho\varphi \, \phi_{\boldsymbol{v}}\phi_\theta \, \mathrm{d}\boldsymbol{v} \, \mathrm{d}\theta = \frac{\overline{\rho\varphi}}{\overline{\rho}} \, . \tag{A.11}$$

La moyenne $\widetilde{\bullet}$ est donc une moyenne de Favre, introduite à l'origine dans le contexte des écoulements monophasiques turbulents pour simplifier l'écriture des équations de Navier-Stokes moyennées lorsque la masse volumique est variable. De manière équivalente, l'utilisation de la moyenne de Favre va simplifier ici l'établissement du système semi-cinétique. En particulier, la vitesse $\boldsymbol{v}$, la température θ et l'énergie interne $e(\theta)$ moyennées au sens de Favre s'écrivent alors :

$$\widetilde{\boldsymbol{v}}(t, \boldsymbol{x}, s) = \frac{1}{\overline{\rho}} \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m\boldsymbol{v} f \, d\boldsymbol{v} \, d\theta = \frac{1}{\overline{\rho}} \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \rho\boldsymbol{v} \, \phi_{\boldsymbol{v}}\phi_\theta \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \, , \tag{A.12}$$

$$\widetilde{\theta}(t, \boldsymbol{x}, s) = \frac{1}{\overline{\rho}} \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m\theta f \, d\boldsymbol{v} \, d\theta = \frac{1}{\overline{\rho}} \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \rho\theta \, \phi_{\boldsymbol{v}}\phi_\theta \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \, , \tag{A.13}$$

$$\widetilde{e}(t, \boldsymbol{x}, s) = \frac{1}{\overline{\rho}} \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} me f \, d\boldsymbol{v} \, d\theta = \frac{1}{\overline{\rho}} \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \rho e \, \phi_{\boldsymbol{v}}\phi_\theta \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \, . \tag{A.14}$$

A.2 Équation sur le nombre de gouttes

Effectuons la première des quatre opérations indiquées en (A.4), et intégrons directement l'équation cinétique sur toutes les vitesses et températures :

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_\theta\int_{\boldsymbol{v}} f\,d\boldsymbol{v}\,d\theta + \nabla_{\boldsymbol{x}}\cdot\left(\int_\theta\int_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{v}f\,d\boldsymbol{v}\,d\theta\right) + \int_\theta\int_{\boldsymbol{v}}\nabla_{\boldsymbol{v}}\cdot(\mathcal{F}f)\,d\boldsymbol{v}\,d\theta + \frac{\partial}{\partial s}\left(\int_\theta\int_{\boldsymbol{v}}\mathcal{K}f\,d\boldsymbol{v}\,d\theta\right) + \int_\theta\int_{\boldsymbol{v}}\frac{\partial}{\partial\theta}(\mathcal{R}f)\,d\boldsymbol{v}\,d\theta = \int_\theta\int_{\boldsymbol{v}}(\Gamma+Q)\,d\boldsymbol{v}\,d\theta\,. \quad \text{(A.15)}$$

Pour une fonction quelconque $y(x)$, la relation suivante est vérifiée :

$$\int_{\boldsymbol{x}^-}^{\boldsymbol{x}^+}\nabla_{\boldsymbol{x}}\cdot[y(\boldsymbol{x})]d\,\boldsymbol{x} = \left[y(\boldsymbol{x})\right]_{\boldsymbol{x}^-}^{\boldsymbol{x}^+}. \quad \text{(A.16)}$$

Par conséquent, en utilisant également les relations (A.5) et (A.10), l'équation (A.15) devient

$$\frac{\partial\overline{n}}{\partial t} + \nabla_{\boldsymbol{x}}\cdot(\overline{n}\,\overline{\boldsymbol{v}}) + \int_\theta\left[\mathcal{F}f\right]_{\boldsymbol{v}=-\infty}^{\boldsymbol{v}=+\infty}d\theta + \frac{\partial}{\partial s}\left(\int_\theta\int_{\boldsymbol{v}}\mathcal{K}f\,d\boldsymbol{v}\,d\theta\right) + \int_{\boldsymbol{v}}\left[\mathcal{R}f\right]_{\theta=0}^{\theta=+\infty}d\boldsymbol{v} = \Gamma_1 + Q_1\,, \quad \text{(A.17)}$$

après avoir posé

$$\Gamma_1 + Q_1 = \int_\theta\int_{\boldsymbol{v}}(\Gamma+Q)\,d\boldsymbol{v}\,d\theta\,. \quad \text{(A.18)}$$

La NDF tendant vers zéro aux limites de l'espace des phases, l'équation sur le nombre de gouttes s'écrit donc finalement :

$$\boxed{\frac{\partial\overline{n}}{\partial t} + \nabla_{\boldsymbol{x}}\cdot(\overline{n}\,\overline{\boldsymbol{v}}) + \frac{\partial}{\partial s}\left(\int_\theta\int_{\boldsymbol{v}}\mathcal{K}f\,d\boldsymbol{v}\,d\theta\right) = \Gamma_1 + Q_1\,.} \quad \text{(A.19)}$$

A.3 Équation sur la masse

Effectuons la deuxième des quatre opérations indiquées en (A.4), et intégrons l'équation cinétique en vitesse et température après multiplication par la masse d'une particule $m(s,\theta)$:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_\theta\int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta)f\,d\boldsymbol{v}\,d\theta + \nabla_{\boldsymbol{x}}\cdot\left(\int_\theta\int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta)\boldsymbol{v}f\,d\boldsymbol{v}\,d\theta\right) + \int_\theta\int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta)\nabla_{\boldsymbol{v}}\cdot(\mathcal{F}f)\,d\boldsymbol{v}\,d\theta + \int_\theta\int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta)\frac{\partial}{\partial s}(\mathcal{K}f)\,d\boldsymbol{v}\,d\theta + \int_\theta\int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta)\frac{\partial}{\partial\theta}(\mathcal{R}f)\,d\boldsymbol{v}\,d\theta = \int_\theta\int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta)\,(\Gamma+Q)\,d\boldsymbol{v}\,d\theta\,. \quad \text{(A.20)}$$

D'après les équations (A.9) et (A.12), et en utilisant le fait que le nombre de gouttes est nul aux bornes d'intégration en vitesse, il vient

$$\frac{\partial\overline{\rho}}{\partial t} + \nabla_{\boldsymbol{x}}\cdot(\widetilde{\rho\boldsymbol{v}}) + \int_\theta\int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta)\frac{\partial}{\partial s}(\mathcal{K}f)\,d\boldsymbol{v}\,d\theta + \int_\theta\int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta)\frac{\partial}{\partial\theta}(\mathcal{R}f)\,d\boldsymbol{v}\,d\theta = \Gamma_2 + Q_2\,, \quad \text{(A.21)}$$

après avoir posé

$$\Gamma_2 + Q_2 = \int_\theta\int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta)\,(\Gamma+Q)\,d\boldsymbol{v}\,d\theta\,. \quad \text{(A.22)}$$

L'équation (A.2) permet d'écrire ensuite :

$$\frac{\partial\overline{\rho}}{\partial t} + \nabla_{\boldsymbol{x}}\cdot(\widetilde{\rho\boldsymbol{v}}) + \tau(s)\int_\theta\int_{\boldsymbol{v}}\rho_0(\theta)\frac{\partial}{\partial s}(\mathcal{K}f)\,d\boldsymbol{v}\,d\theta + \tau(s)\int_\theta\int_{\boldsymbol{v}}\rho_0(\theta)\frac{\partial}{\partial\theta}(\mathcal{R}f)\,d\boldsymbol{v}\,d\theta = \Gamma_2 + Q_2\,. \quad \text{(A.23)}$$

La permutation des opérateurs de dérivation et d'intégration dans le terme d'évaporation, et l'intégration par parties du terme de flux de chaleur mènent à l'équation suivante :

$$\frac{\partial\overline{\rho}}{\partial t} + \nabla_{\boldsymbol{x}}\cdot(\widetilde{\rho\boldsymbol{v}}) + \tau(s)\frac{\partial}{\partial s}\left(\int_\theta\int_{\boldsymbol{v}}\rho_0(\theta)\mathcal{K}f\,d\boldsymbol{v}\,d\theta\right) + \tau(s)\int_{\boldsymbol{v}}\left[\rho_0(\theta)\mathcal{R}f\right]_{\theta=0}^{\theta=+\infty}d\boldsymbol{v} - \tau(s)\int_\theta\int_{\boldsymbol{v}}\frac{d\rho_0(\theta)}{d\theta}\mathcal{R}f\,d\boldsymbol{v}\,d\theta = \Gamma_2 + Q_2\,. \quad \text{(A.24)}$$

Finalement, l'équation sur la masse du système semi-cinétique est donnée par :

$$\boxed{\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \nabla_{\boldsymbol{x}} \cdot (\widetilde{\rho \boldsymbol{v}}) + \tau(s) \frac{\partial}{\partial s} \left(\int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \rho_0(\theta) \mathcal{K} f \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \right) - \tau(s) \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \frac{d}{d\theta} \left[\rho_0(\theta) \right] \mathcal{R} f \, d\boldsymbol{v} \, d\theta = \Gamma_2 + Q_2 \, .} \tag{A.25}$$

La différence par rapport au système semi-cinétique de la littérature, induite par la prise en compte de la dépendance en température, apparait ici par l'intermédiaire du terme en $\rho_0'(\theta)$ qui s'annule lorsque l'on considère la masse volumique indépendante de la température.

A.4 Équation sur la quantité de mouvement

Effectuons la troisième des quatre opérations indiquées en (A.4), et intégrons l'équation cinétique en vitesse et température après multiplication par la quantité de mouvement d'une particule $m(s,\theta)\boldsymbol{v}$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta) \boldsymbol{v} f \, d\boldsymbol{v} \, d\theta + \nabla_{\boldsymbol{x}} \cdot \left(\int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta) f \boldsymbol{v} \otimes \boldsymbol{v} \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \right) + \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta) \boldsymbol{v} \, \nabla_{\boldsymbol{v}} \cdot (\mathcal{F} f) \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \\ + \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta) \boldsymbol{v} \frac{\partial}{\partial s} (\mathcal{K} f) \, d\boldsymbol{v} \, d\theta + \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta) \boldsymbol{v} \frac{\partial}{\partial \theta} (\mathcal{R} f) \, d\boldsymbol{v} \, d\theta = \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta) \boldsymbol{v} \, (\Gamma + Q) \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \, . \end{aligned} \tag{A.26}$$

De la même manière que pour l'équation sur la masse, on procède à une intégration par parties sur le terme de divergence dans l'espace des vitesses, ainsi que sur le terme d'échange de chaleur. En utilisant de plus les définitions des moyennes introduites précédemment, l'équation sur la quantité de mouvement se réécrit

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\widetilde{\rho \boldsymbol{v}}) + \nabla_{\boldsymbol{x}} \cdot \left(\int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta) f \boldsymbol{v} \otimes \boldsymbol{v} \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \right) + \int_\theta \left[m(s,\theta) \mathcal{F} f \boldsymbol{v} \right]_{\boldsymbol{v}=-\infty}^{\boldsymbol{v}=+\infty} d\theta - \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta) \mathcal{F} f \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \\ + \tau(s) \frac{\partial}{\partial s} \left(\int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \rho_0(\theta) \mathcal{K} f \boldsymbol{v} \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \right) + \tau(s) \int_{\boldsymbol{v}} \left[\rho_0(\theta) \mathcal{R} f \boldsymbol{v} \right]_{\theta=0}^{\theta=+\infty} d\boldsymbol{v} - \tau(s) \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \frac{d}{d\theta} [\rho_0(\theta)] \mathcal{R} f \boldsymbol{v} \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \\ = \Gamma_3 + Q_3 \, , \end{aligned} \tag{A.27}$$

après avoir posé

$$\Gamma_3 + Q_3 = \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta) \boldsymbol{v} \, (\Gamma + Q) \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \, . \tag{A.28}$$

La fonction de distribution est nulle aux bornes des intégrales en vitesse et température, on a donc :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\widetilde{\rho \boldsymbol{v}}) + \nabla_{\boldsymbol{x}} \cdot \left(\int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta) f \boldsymbol{v} \otimes \boldsymbol{v} \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \right) - \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta) \mathcal{F} f \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \\ + \tau(s) \frac{\partial}{\partial s} \left(\int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \rho_0(\theta) \mathcal{K} f \boldsymbol{v} \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \right) - \tau(s) \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \frac{d}{d\theta} [\rho_0(\theta)] \mathcal{R} f \boldsymbol{v} \, d\boldsymbol{v} \, d\theta = \Gamma_3 + Q_3 \, . \end{aligned} \tag{A.29}$$

Développons à part le terme de divergence dans l'espace physique que nous appelons I, en décomposant la vitesse $\boldsymbol{v}$ en sa moyenne de Favre et une fluctuation : $\boldsymbol{v} = \widetilde{\boldsymbol{v}} + \boldsymbol{v}''$. Il vient :

$$\begin{aligned} I &= \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta) f \boldsymbol{v} \otimes \boldsymbol{v} \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \\ I &= \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta) f (\boldsymbol{v} - \widetilde{\boldsymbol{v}} + \widetilde{\boldsymbol{v}}) \otimes (\boldsymbol{v} - \widetilde{\boldsymbol{v}} + \widetilde{\boldsymbol{v}}) \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \\ I &= \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta) f (\boldsymbol{v} - \widetilde{\boldsymbol{v}}) \otimes (\boldsymbol{v} - \widetilde{\boldsymbol{v}}) \, d\boldsymbol{v} \, d\theta + \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta) f (\boldsymbol{v} - \widetilde{\boldsymbol{v}}) \otimes \widetilde{\boldsymbol{v}} \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \\ &+ \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta) f \widetilde{\boldsymbol{v}} \otimes (\boldsymbol{v} - \widetilde{\boldsymbol{v}}) \, d\boldsymbol{v} \, d\theta + \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta) f \widetilde{\boldsymbol{v}} \otimes \widetilde{\boldsymbol{v}} \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \\ I &= \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta) f \boldsymbol{v}'' \otimes \boldsymbol{v}'' \, d\boldsymbol{v} \, d\theta + \left(\int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta) f \boldsymbol{v}'' \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \right) \otimes \widetilde{\boldsymbol{v}} \\ &+ \widetilde{\boldsymbol{v}} \otimes \left(\int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta) f \boldsymbol{v}'' \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \right) + \widetilde{\boldsymbol{v}} \otimes \widetilde{\boldsymbol{v}} \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta) f \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \\ I &= \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta) f \boldsymbol{v}'' \otimes \boldsymbol{v}'' \, d\boldsymbol{v} \, d\theta + \overline{\rho} \widetilde{\boldsymbol{v}''} \otimes \widetilde{\boldsymbol{v}} + \widetilde{\boldsymbol{v}} \otimes \overline{\rho} \widetilde{\boldsymbol{v}''} + \overline{\rho} \widetilde{\boldsymbol{v}} \otimes \widetilde{\boldsymbol{v}} \end{aligned}$$

Les moyennes de Favre des fluctuations de vitesse sont nulles par définition : $\widetilde{\boldsymbol{v}''} = 0$. De plus, $\widetilde{\widetilde{\boldsymbol{v}}} = \widetilde{\boldsymbol{v}}$. Le terme I se réécrit finalement :

$$\begin{aligned} I &= \overline{\rho\boldsymbol{v}} \otimes \widetilde{\boldsymbol{v}} + \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta) f \boldsymbol{v}'' \otimes \boldsymbol{v}'' \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \,, \\ I &= \overline{\rho\boldsymbol{v}} \otimes \widetilde{\boldsymbol{v}} + \boldsymbol{P} \,, \end{aligned}$$

où le tenseur $\boldsymbol{P}$ représente l'équivalent d'un terme de pression caractérisant la dispersion en vitesse des gouttes (produit tensoriel des fluctuations de vitesse). Il ne s'agit pas de la pression du liquide constituant les gouttes, il s'agit d'une pression "artificielle", définie de façon analogue à une pression de gaz dont les molécules seraient ici les particules de la phase dispersée. D'après la relation (A.9), ce tenseur de pression particulaire peut être reformulé en fonction des distributions en vitesse et température :

$$\boldsymbol{P} = \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \rho \boldsymbol{v}'' \otimes \boldsymbol{v}'' \, \phi_{\boldsymbol{v}} \phi_\theta \, d\boldsymbol{v} \, d\theta = \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \rho (\boldsymbol{v} - \widetilde{\boldsymbol{v}}) \otimes (\boldsymbol{v} - \widetilde{\boldsymbol{v}}) \, \phi_{\boldsymbol{v}} \phi_\theta \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \,. \tag{A.30}$$

En intégrant les développements sur le terme de divergence dans l'espace physique, l'équation du système semi-cinétique sur la quantité de mouvement s'écrit finalement :

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho\boldsymbol{v}}) + \nabla_{\boldsymbol{x}} \cdot (\overline{\rho\boldsymbol{v}} \otimes \widetilde{\boldsymbol{v}} + \boldsymbol{P}) - \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta) \mathcal{F} f \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \\ &\qquad + \tau(s) \frac{\partial}{\partial s} \left(\int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \rho_0(\theta) \mathcal{K} f \boldsymbol{v} \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \right) - \tau(s) \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \frac{d}{d\theta} \left[\rho_0(\theta) \right] \mathcal{R} f \boldsymbol{v} \, d\boldsymbol{v} \, d\theta = \Gamma_3 + Q_3 \,. \end{aligned} \tag{A.31}$$

Comme dans l'équation pour la masse, il apparait un terme lié à la dérivée en température qui s'annule lorsque la masse volumique thermodynamique est constante.

A.5 Équation sur l'énergie interne

Effectuons la quatrième et dernière des opérations indiquées en (A.4), et intégrons l'équation cinétique en vitesse et température après multiplication par l'énergie interne d'une particule $m(s,\theta)e(\theta)$:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t} \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta) e(\theta) f \, d\boldsymbol{v} \, d\theta + \nabla_{\boldsymbol{x}} \cdot \left(\int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta) e(\theta) \boldsymbol{v} f \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \right) + \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta) e(\theta) \nabla_{\boldsymbol{v}} \cdot (\mathcal{F} f) \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \\ &+ \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta) e(\theta) \frac{\partial}{\partial s} (\mathcal{K} f) \, d\boldsymbol{v} \, d\theta + \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta) e(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} (\mathcal{R} f) \, d\boldsymbol{v} \, d\theta = \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta) e(\theta) (\Gamma + Q) \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \,. \end{aligned} \tag{A.32}$$

Les relations (A.2) et (A.14) permettent d'écrire

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho e}) + \nabla_{\boldsymbol{x}} \cdot (\overline{\rho \boldsymbol{v} e}) + \int_\theta m(s,\theta) e(\theta) \left[\mathcal{F} f \right]_{\boldsymbol{v}=-\infty}^{\boldsymbol{v}=+\infty} d\theta + \tau(s) \frac{\partial}{\partial s} \left(\int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \rho_0(\theta) e(\theta) \mathcal{K} f \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \right) \\ &\qquad + \tau(s) \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \rho_0(\theta) e(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} (\mathcal{R} f) \, d\boldsymbol{v} \, d\theta = \Gamma_4 + Q_4 \,, \end{aligned} \tag{A.33}$$

après avoir posé

$$\Gamma_4 + Q_4 = \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} m(s,\theta) e(\theta) (\Gamma + Q) \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \,. \tag{A.34}$$

La fonction de distribution est nulle aux bornes d'intégration en vitesse. Avec une intégration par parties sur le terme d'échange de chaleur, il vient :

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho e}) + \nabla_{\boldsymbol{x}} \cdot (\overline{\rho \boldsymbol{v} e}) + \tau(s) \frac{\partial}{\partial s} \left(\int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \rho_0(\theta) e(\theta) \mathcal{K} f \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \right) + \tau(s) \int_{\boldsymbol{v}} \left[\rho_0(\theta) e(\theta) \mathcal{R} f \right]_{\theta=0}^{\theta=+\infty} d\boldsymbol{v} \\ &\qquad - \tau(s) \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \frac{d}{d\theta} [\rho_0(\theta) e(\theta)] \mathcal{R} f \, d\boldsymbol{v} \, d\theta = \Gamma_4 + Q_4 \,. \end{aligned} \tag{A.35}$$

La fonction de distribution est nulle aux bornes d'intégration en température, l'équation sur l'énergie interne devient :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho e}) + \nabla_{\boldsymbol{x}} \cdot (\overline{\rho \boldsymbol{v} e}) + \tau(s) \frac{\partial}{\partial s} \left(\int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \rho_0(\theta) e(\theta) \mathcal{K} f \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \right) - \tau(s) \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \frac{d}{d\theta} [\rho_0(\theta) e(\theta)] \mathcal{R} f \, d\boldsymbol{v} \, d\theta = \Gamma_4 + Q_4 \,. \tag{A.36}$$

Si l'on explicite à part le terme de dérivée en température, nous avons d'après la définition (A.3) de l'énergie interne :

$$\frac{d}{d\theta}[\rho_0(\theta)e(\theta)] = \frac{d}{d\theta}[\rho_0(\theta)c_p(\theta)\theta] = \theta\frac{d}{d\theta}[\rho_0(\theta)c_p(\theta)] + \rho_0(\theta)c_p(\theta)\,. \tag{A.37}$$

L'équation sur l'énergie interne s'écrit finalement :

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}(\widetilde{\rho e}) + \nabla_{\boldsymbol{x}}\cdot(\widetilde{\rho \boldsymbol{v} e}) + \tau(s)\frac{\partial}{\partial s}\left(\int_\theta\int_{\boldsymbol{v}}\rho_0(\theta)e(\theta)\mathcal{K}f\,d\boldsymbol{v}\,d\theta\right) - \tau(s)\int_\theta\int_{\boldsymbol{v}}\rho_0(\theta)c_p(\theta)\mathcal{R}f\,d\boldsymbol{v}\,d\theta \\ - \tau(s)\int_\theta\int_{\boldsymbol{v}}\theta\frac{d}{d\theta}[\rho_0(\theta)c_p(\theta)]\mathcal{R}f\,d\boldsymbol{v}\,d\theta = \Gamma_4 + Q_4\,.\end{aligned} \tag{A.38}$$

Encore une fois, le terme lié à la dérivée en température n'apparait pas dans la formulation classique. Il s'annule si les propriétés thermodynamiques sont indépendantes de la température. En outre, le terme $\widetilde{\boldsymbol{v}e}$ n'est pas fermé. De la même manière que pour l'équation sur la quantité de mouvement, il peut être décomposé de la façon suivante :

$$\widetilde{\boldsymbol{v}e} = \widetilde{\boldsymbol{v}}\widetilde{e} + \widetilde{\boldsymbol{v}''e''} = \widetilde{\boldsymbol{v}}\widetilde{e} + \int_\theta\int_{\boldsymbol{v}}\rho\boldsymbol{v}''e''\,\phi_{\boldsymbol{v}}\phi_\theta\,d\boldsymbol{v}\,d\theta = \widetilde{\boldsymbol{v}}\widetilde{e} + \int_\theta\int_{\boldsymbol{v}}\rho(\boldsymbol{v}-\widetilde{\boldsymbol{v}})(e-\widetilde{e})\,\phi_{\boldsymbol{v}}\phi_\theta\,d\boldsymbol{v}\,d\theta\,. \tag{A.39}$$

La fermeture du terme lié au produit des fluctuations dépend des hypothèses opérées ultérieurement sur la forme des distributions en vitesse et température ($\phi_{\boldsymbol{v}}$ et ϕ_θ).

A.6 Bilan du système semi-cinétique obtenu

Le système semi-cinétique est constitué des équations bilan (A.19), (A.25), (A.31) et (A.38), portant respectivement sur le nombre de gouttes, la masse, la quantité de mouvement et l'énergie interne. Les notations (A.41) sont introduites en appliquant les définitions des moyennes (A.10) et (A.11) aux termes de variation de taille $\mathcal{K}$, de vitesse $\mathcal{F}$ et de température $\mathcal{R}$, et en définissant la fraction volumique moyenne au niveau semi-cinétique, produit de la densité en nombre et du volume d'une goutte :

$$\overline{\alpha}(t,\boldsymbol{x},s) = \tau(s)\overline{n}(t,\boldsymbol{x},s) = \frac{\rho(t,\boldsymbol{x},s,\theta)}{\rho_0(\theta)} = \frac{\overline{\rho}(t,\boldsymbol{x},s)}{\overline{\rho_0}}\,. \tag{A.40}$$

De plus, on note que l'opérateur divergence dans l'espace des vitesses $\nabla_{\boldsymbol{v}}$ a disparu des équations. Seule reste la divergence dans l'espace physique $\nabla_{\boldsymbol{x}}$. Puisqu'il n'y a plus d'ambiguïté, nous pouvons noter à présent $\nabla = \nabla_{\boldsymbol{x}}$. Finalement, en introduisant les notations (A.42) pour désigner les termes liés à la dépendance en température des variables thermodynamiques, puis en rappelant les définitions (A.43) des termes moyens liés à la coalescence et la fragmentation, la définition (A.44) du tenseur de pression et la relation (A.39) sur la fermeture du terme $\widetilde{\boldsymbol{v}e}$, le système cinétique peut s'écrire sous la forme (A.45).

$$\left\{\begin{array}{lcl}
\overline{n}\overline{\mathcal{K}} &=& \displaystyle\int_\theta\int_{\boldsymbol{v}}\mathcal{K}f\,d\boldsymbol{v}\,d\theta \\
\overline{\rho}\widetilde{\mathcal{K}} &=& \displaystyle\tau(s)\int_\theta\int_{\boldsymbol{v}}\rho_0(\theta)\mathcal{K}f\,d\boldsymbol{v}\,d\theta \\
\overline{\rho}\widetilde{\mathcal{K}\boldsymbol{v}} &=& \displaystyle\tau(s)\int_\theta\int_{\boldsymbol{v}}\rho_0(\theta)\mathcal{K}\boldsymbol{v}f\,d\boldsymbol{v}\,d\theta \\
\overline{\rho}\widetilde{\mathcal{K}e} &=& \displaystyle\tau(s)\int_\theta\int_{\boldsymbol{v}}\rho_0(\theta)\mathcal{K}ef\,d\boldsymbol{v}\,d\theta \\
\overline{\rho}\widetilde{\mathcal{F}} &=& \displaystyle\tau(s)\int_\theta\int_{\boldsymbol{v}}\rho_0(\theta)\mathcal{F}f\,d\boldsymbol{v}\,d\theta \\
\overline{\rho}\widetilde{c_p\mathcal{R}} &=& \displaystyle\tau(s)\int_\theta\int_{\boldsymbol{v}}\rho_0(\theta)c_p(\theta)\mathcal{R}f\,d\boldsymbol{v}\,d\theta
\end{array}\right. \iff \left\{\begin{array}{lcl}
\overline{n}\overline{\mathcal{K}} &=& \displaystyle\overline{n}\int_\theta\int_{\boldsymbol{v}}\mathcal{K}\,\phi_{\boldsymbol{v}}\phi_\theta\,d\boldsymbol{v}\,d\theta \\
\overline{\rho}\widetilde{\mathcal{K}} &=& \displaystyle\overline{\alpha}\int_\theta\int_{\boldsymbol{v}}\rho_0(\theta)\mathcal{K}\,\phi_{\boldsymbol{v}}\phi_\theta\,d\boldsymbol{v}\,d\theta \\
\overline{\rho}\widetilde{\mathcal{K}\boldsymbol{v}} &=& \displaystyle\overline{\alpha}\int_\theta\int_{\boldsymbol{v}}\rho_0(\theta)\mathcal{K}\boldsymbol{v}\,\phi_{\boldsymbol{v}}\phi_\theta\,d\boldsymbol{v}\,d\theta \\
\overline{\rho}\widetilde{\mathcal{K}e} &=& \displaystyle\overline{\alpha}\int_\theta\int_{\boldsymbol{v}}\rho_0(\theta)\mathcal{K}e\,\phi_{\boldsymbol{v}}\phi_\theta\,d\boldsymbol{v}\,d\theta \\
\overline{\rho}\widetilde{\mathcal{F}} &=& \displaystyle\overline{\alpha}\int_\theta\int_{\boldsymbol{v}}\rho_0(\theta)\mathcal{F}\,\phi_{\boldsymbol{v}}\phi_\theta\,d\boldsymbol{v}\,d\theta \\
\overline{\rho}\widetilde{c_p\mathcal{R}} &=& \displaystyle\overline{\alpha}\int_\theta\int_{\boldsymbol{v}}\rho_0(\theta)c_p(\theta)\mathcal{R}\,\phi_{\boldsymbol{v}}\phi_\theta\,d\boldsymbol{v}\,d\theta
\end{array}\right. \tag{A.41}$$

$$\begin{cases} \Delta_\rho &= \displaystyle\int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \frac{d}{d\theta}\left[\rho_0(\theta)\right] \mathcal{R} f \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \\ \Delta_{\rho\boldsymbol{v}} &= \displaystyle\int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \frac{d}{d\theta}\left[\rho_0(\theta)\right] \mathcal{R} f \boldsymbol{v} \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \\ \Delta_{\rho e} &= \displaystyle\int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \frac{d}{d\theta}[\rho_0(\theta) c_p(\theta)] \mathcal{R} f \theta \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \end{cases} \tag{A.42}$$

$$\begin{cases} \Gamma_1 + Q_1 &= \displaystyle\int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} (\Gamma + Q) \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \\ \Gamma_2 + Q_2 &= \tau(s) \displaystyle\int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \rho_0(\theta) \, (\Gamma + Q) \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \\ \Gamma_3 + Q_3 &= \tau(s) \displaystyle\int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \rho_0(\theta) \boldsymbol{v} \, (\Gamma + Q) \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \\ \Gamma_4 + Q_4 &= \tau(s) \displaystyle\int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \rho_0(\theta) e \, (\Gamma + Q) \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \end{cases} \tag{A.43}$$

$$\boldsymbol{P} = \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \rho(\boldsymbol{v} - \overline{\boldsymbol{v}}) \otimes (\boldsymbol{v} - \overline{\boldsymbol{v}}) \, \phi_{\boldsymbol{v}} \phi_\theta \, d\boldsymbol{v} \, d\theta = \overline{\alpha} \int_\theta \int_{\boldsymbol{v}} \rho_0(\theta) (\boldsymbol{v} - \widetilde{\boldsymbol{v}}) \otimes (\boldsymbol{v} - \widetilde{\boldsymbol{v}}) \, \phi_{\boldsymbol{v}} \phi_\theta \, d\boldsymbol{v} \, d\theta \tag{A.44}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \overline{n}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{n}\,\overline{\boldsymbol{v}}) = \Gamma_1 + Q_1 - \dfrac{\partial}{\partial s}\left(\overline{n}\overline{\mathcal{K}}\right) \\ \dfrac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\widetilde{\rho\boldsymbol{v}}) = \Gamma_2 + Q_2 - \tau(s)\dfrac{\partial}{\partial s}\left(\dfrac{\overline{\rho}\widetilde{\mathcal{K}}}{\tau(s)}\right) + \tau(s)\Delta_\rho \\ \dfrac{\partial \widetilde{\rho\boldsymbol{v}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\widetilde{\rho\boldsymbol{v}} \otimes \widetilde{\boldsymbol{v}} + \boldsymbol{P}) = \Gamma_3 + Q_3 - \tau(s)\dfrac{\partial}{\partial s}\left(\dfrac{\widetilde{\rho\mathcal{K}\boldsymbol{v}}}{\tau(s)}\right) + \tau(s)\Delta_{\rho\boldsymbol{v}} + \overline{\rho}\widetilde{\mathcal{F}} \\ \dfrac{\partial \widetilde{\rho e}}{\partial t} + \nabla \cdot (\widetilde{\rho\boldsymbol{v}e}) = \Gamma_4 + Q_4 - \tau(s)\dfrac{\partial}{\partial s}\left(\dfrac{\widetilde{\rho\mathcal{K}e}}{\tau(s)}\right) + \tau(s)\Delta_{\rho e} + \overline{\rho}\widetilde{c_p\mathcal{R}} \end{cases} \tag{A.45}$$

Annexe B

Établissement de modèles eulériens intégrés sur l'espace des tailles

Cette annexe présente de manière détaillée les étapes successives qui permettent d'établir, à partir du système semi-cinétique (3.53), l'ensemble des modèles eulériens classiques pour la phase dispersée : modèle bi-fluide, modèle multi-classe et modèles sectionnels. Nous commençons par adopter un formalisme générique quant à la discrétisation de l'espace des tailles et la représentation de la distribution. De cette manière, il est possible de conserver une forme générique jusqu'à un niveau assez bas dans la dérivation des équations. Une fois cette étape franchie, les hypothèses inhérentes à chaque modèle peuvent être spécifiées, ce qui permet d'établir les systèmes d'équations finaux de chaque modèle. La procédure générique permettant d'établir les différents modèles implique de procéder aux opérations suivantes :

- formuler l'hypothèse de monodispersion en vitesse et température (cf. § 3.4.3.2) : il existe une seule vitesse moyenne $\widetilde{v}(t, \boldsymbol{x}, s)$, une seule température moyenne $\widetilde{\theta}(t, \boldsymbol{x}, s)$, et donc une seule énergie interne $\widetilde{e}(t, \boldsymbol{x}, s)$ moyenne pour une taille s donnée. En conséquence de cette hypothèse, le tenseur de pression particulaire $\boldsymbol{P}$ est nul et les termes $\widetilde{\boldsymbol{v}e}$, $\widetilde{\mathcal{K}\boldsymbol{v}}$ et $\widetilde{\mathcal{K}e}$ peuvent se reformuler respectivement en $\widetilde{\boldsymbol{v}}\,\widetilde{e}$, $\widetilde{\mathcal{K}}\,\widetilde{\boldsymbol{v}}$ et $\widetilde{\mathcal{K}}\,\widetilde{e}$ (cf. relation (A.39) en Annexe A).
- négliger les termes de dilatation Δ_ρ, $\Delta_{\rho\boldsymbol{v}}$ et $\Delta_{\rho e}$, mis en évidence lors de l'établissement du système semi-cinétique avec propriétés thermodynamiques fonctions de la température (cf. Annexe A). Nous faisons ce choix ici dans le but de retrouver les expressions classiques des modèles de la littérature.
- discrétiser l'espace des tailles I_s en un nombre N_s d'intervalles consécutifs ($N_s \geq 1$), chaque intervalle $I_s^{(k)} = [s_{k-1}, s_k[$, tel que $1 \leq k \leq N_s$, étant de taille non nulle ($s_{k-1} < s_k$), et l'union de ces intervalles représentant l'ensemble de l'espace des tailles (voir la Figure B.1), c'est-à-dire

$$I_s = \bigcup_{k=1}^{N_s} I_s^{(k)} = [0, +\infty[\ . \tag{B.1}$$

- proposer une représentation de la distribution en taille dans chaque intervalle, telle que l'on puisse écrire la densité en nombre de gouttes dans chaque intervalle comme

$$\overline{n}^{(k)}(t, \boldsymbol{x}, s) = n^{(k)}(t, \boldsymbol{x}) \phi_s^{(k)}(t, \boldsymbol{x}, s) \ , \tag{B.2}$$

  où $\phi_s^{(k)}$ est une distribution normalisée [1], c'est-à-dire telle que :

$$\int_{I_s^{(k)}} \phi_s^{(k)}(t, \boldsymbol{x}, s) \, \mathrm{d}s = 1 \ . \tag{B.3}$$

- finalement, intégrer le système semi-cinétique (3.53) sur l'espace des tailles $I_s = [0, +\infty[$, c'est-à-dire :

$$\int_{I_s} \text{Sys. (3.53)} \, \mathrm{d}s \ . \tag{B.4}$$

1. Plutôt que d'introduire $\phi_s^{(k)}(t, \boldsymbol{x}, s)$, certains auteurs préfèrent travailler directement avec $\overline{n}^{(k)}(t, \boldsymbol{x}, s)$, qui est alors souvent noté $\kappa^{(k)}(t, \boldsymbol{x}, s)$ et dont l'intégrale sur la section k désigne directement le moment $n^{(k)}(t, \boldsymbol{x})$.

On note que la densité en nombre de gouttes totale pour une taille s donnée (celle qui intervient dans les équations du système semi-cinétique) peut s'écrire

$$\overline{n}(t,\boldsymbol{x},s) = \sum_{k=1}^{N_s} \overline{n}^{(k)}(t,\boldsymbol{x},s) = \sum_{k=1}^{N_s} n^{(k)}(t,\boldsymbol{x})\,\phi_s^{(k)}(t,\boldsymbol{x},s)\,. \tag{B.5}$$

La densité en nombre de gouttes intégrée sur la variable taille, restreinte à un intervalle $I_s^{(k)}$, est donnée par

$$n^{(k)}(t,\boldsymbol{x}) = \int_{I_s^{(k)}} \overline{n}^{(k)}(t,\boldsymbol{x},s)\,\mathrm{d}s\,. \tag{B.6}$$

Et la densité en nombre de gouttes totale intégrée sur la variable taille (tous intervalles compris) est alors

$$n(t,\boldsymbol{x}) \;=\; \sum_{k=1}^{N_s} n^{(k)}(t,\boldsymbol{x}) \;=\; \sum_{k=1}^{N_s} \int_{I_s^{(k)}} \overline{n}^{(k)}(t,\boldsymbol{x},s)\,\mathrm{d}s \;=\; \int_{I_s} \overline{n}(t,\boldsymbol{x},s)\,\mathrm{d}s\,. \tag{B.7}$$

De même, la fraction volumique totale pour une taille s donnée (également celle qui intervient dans les équations du système semi-cinétique) s'exprime

$$\overline{\alpha}(t,\boldsymbol{x},s) = \tau(s)\,\overline{n}(t,\boldsymbol{x},s) = \sum_{k=1}^{N_s} n^{(k)}(t,\boldsymbol{x})\,\tau(s)\,\phi_s^{(k)}(t,\boldsymbol{x},s)\,. \tag{B.8}$$

On note que la fraction volumique au niveau semi-cinétique, restreinte à un intervalle $I_s^{(k)}$, est donnée par

$$\overline{\alpha}^{(k)}(t,\boldsymbol{x},s) \;=\; \tau(s)\overline{n}^{(k)}(t,\boldsymbol{x},s) \;=\; n^{(k)}(t,\boldsymbol{x})\,\tau(s)\,\phi_s^{(k)}(t,\boldsymbol{x},s)\,. \tag{B.9}$$

La fraction volumique intégrée sur l'intervalle $I_s^{(k)}$ s'exprime donc

$$\alpha^{(k)}(t,\boldsymbol{x}) \;=\; \int_{I_s^{(k)}} \overline{\alpha}^{(k)}(t,\boldsymbol{x},s)\,\mathrm{d}s \;=\; n^{(k)}(t,\boldsymbol{x}) \int_{I_s^{(k)}} \tau(s)\,\phi_s^{(k)}(t,\boldsymbol{x},s)\,\mathrm{d}s\,. \tag{B.10}$$

Et on obtient finalement une définition de la fraction volumique totale comme

$$\alpha(t,\boldsymbol{x}) \;=\; \sum_{k=1}^{N_s} \alpha^{(k)}(t,\boldsymbol{x}) \;=\; \sum_{k=1}^{N_s} n^{(k)}(t,\boldsymbol{x}) \int_{I_s^{(k)}} \tau(s)\,\phi_s^{(k)}(t,\boldsymbol{x},s)\,\mathrm{d}s\,. \tag{B.11}$$

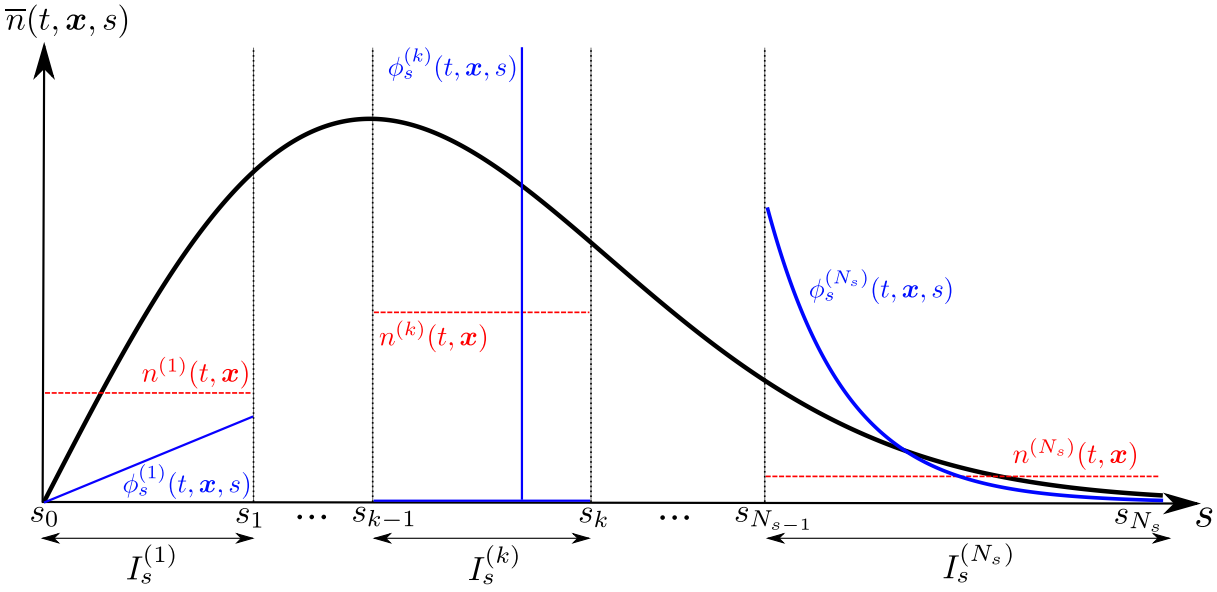


FIGURE B.1 – ***Discrétisation de l'espace des tailles et différentes distributions possibles dans un intervalle de taille.***

Dans la suite, nous détaillons les étapes calculatoires consécutives à la procédure décrite ci-dessus. Afin d'alléger l'écriture des équations, nous n'écrivons que la dépendance éventuelle en la variable taille et omettons les autres dépendances.

B.1 Intégration en taille générique du système semi-cinétique

B.1.1 Équation sur le nombre de gouttes

Commençons par intégrer sur l'espace des tailles l'équation sur le nombre de gouttes du système semi-cinétique :

$$\int_{I_s} \frac{\partial \overline{n}(s)}{\partial t}\,\mathrm{d}s + \int_{I_s} \nabla\cdot\left(\overline{n}(s)\,\overline{\boldsymbol{v}}(s)\right)\,\mathrm{d}s \;=\; \int_{I_s}\Big[\Gamma_1(s)+Q_1(s)\Big]\,\mathrm{d}s - \int_{I_s}\frac{\partial}{\partial s}\left(\overline{n}(s)\overline{\mathcal{K}}(s)\right)\,\mathrm{d}s\,. \tag{B.12}$$

En utilisant la relation (B.5), il vient :

$$\int_{I_s}\frac{\partial}{\partial t}\left(\sum_{k=1}^{N_s} n^{(k)}\phi_s^{(k)}(s)\right)\mathrm{d}s + \int_{I_s}\nabla\cdot\left[\left(\sum_{k=1}^{N_s} n^{(k)}\phi_s^{(k)}(s)\right)\overline{\boldsymbol{v}}(s)\right]\mathrm{d}s \;=\; \int_{I_s}\Big[\Gamma_1(s)+Q_1(s)\Big]\,\mathrm{d}s \\ - \int_{I_s}\frac{\partial}{\partial s}\left[\left(\sum_{k=1}^{N_s} n^{(k)}\phi_s^{(k)}(s)\right)\overline{\mathcal{K}}(s)\right]\mathrm{d}s\,. \tag{B.13}$$

Par permutation des opérateurs de dérivation, d'intégration et de somme, et en sortant les termes indépendants de la taille, nous avons :

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\sum_{k=1}^{N_s} n^{(k)}\int_{I_s^{(k)}}\phi_s^{(k)}(s)\,\mathrm{d}s\right) + \nabla\cdot\left(\sum_{k=1}^{N_s} n^{(k)}\int_{I_s^{(k)}}\overline{\boldsymbol{v}}(s)\,\phi_s^{(k)}(s)\,\mathrm{d}s\right) \;=\; \sum_{k=1}^{N_s}\int_{I_s^{(k)}}\Big[\Gamma_1(s)+Q_1(s)\Big]\,\mathrm{d}s \\ - \sum_{k=1}^{N_s}\left(n^{(k)}\int_{I_s^{(k)}}\frac{\partial}{\partial s}\left[\phi_s^{(k)}(s)\overline{\mathcal{K}}(s)\right]\mathrm{d}s\right)\,. \tag{B.14}$$

Notons désormais $\widehat{\Gamma_1}^{(k)}$ et $\widehat{Q_1}^{(k)}$ les termes de fragmentation et de coalescence intégrés sur l'intervalle de taille $I_s^{(k)}$. L'expression de ces termes ne sera pas détaillée davantage ici. De par la relation de normalisation (B.3), et en utilisant également la relation mathématique (A.16), il vient :

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\sum_{k=1}^{N_s} n^{(k)}\right) + \nabla\cdot\left(\sum_{k=1}^{N_s} n^{(k)}\int_{I_s^{(k)}}\overline{\boldsymbol{v}}(s)\,\phi_s^{(k)}(s)\,\mathrm{d}s\right) \;=\; \sum_{k=1}^{N_s}\left(\widehat{\Gamma_1}^{(k)}+\widehat{Q_1}^{(k)}\right) - \sum_{k=1}^{N_s}\left(n^{(k)}\left[\phi_s^{(k)}(s)\overline{\mathcal{K}}(s)\right]_{s_{k-1}}^{s_k}\right)\,. \tag{B.15}$$

Nous obtenons alors l'équation générique suivante pour la densité en nombre de gouttes :

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\sum_{k=1}^{N_s} n^{(k)}\right) + \nabla\cdot\left(\sum_{k=1}^{N_s} n^{(k)}\int_{I_s^{(k)}}\overline{\boldsymbol{v}}(s)\,\phi_s^{(k)}(s)\,\mathrm{d}s\right) \;=\; \sum_{k=1}^{N_s}\left(\widehat{\Gamma_1}^{(k)}+\widehat{Q_1}^{(k)}\right) \\ - \sum_{k=1}^{N_s}\left(n^{(k)}\left[\phi_s^{(k)}(s_k)\overline{\mathcal{K}}(s_k) - \phi_s^{(k)}(s_{k-1})\overline{\mathcal{K}}(s_{k-1})\right]\right)\,. \tag{B.16}$$

Nous allons poser ensuite :

$$\boxed{\begin{cases} \mathcal{N}_+^{(k)} &= -n^{(k)}\phi_s^{(k)}(s_k)\overline{\mathcal{K}}(s_k) \\ \mathcal{N}_-^{(k)} &= -n^{(k)}\phi_s^{(k)}(s_{k-1})\overline{\mathcal{K}}(s_{k-1}) \end{cases}} \tag{B.17}$$

Ces deux termes représentent des flux aux bornes de l'intervalle $I_s^{(k)}$, liés à l'évaporation . On remarque qu'il est possible de n'écrire qu'une seule grande somme, ce qui revient à résoudre N_s équations différentes. On peut donc adopter une notation allégée en écrivant seulement l'équation pour un intervalle de taille $I_s^{(k)}$ quelconque :

$$\boxed{\frac{\partial n^{(k)}}{\partial t} + \nabla\cdot\left(n^{(k)}\int_{I_s^{(k)}}\overline{\boldsymbol{v}}(s)\,\phi_s^{(k)}(s)\,\mathrm{d}s\right) \;=\; \widehat{\Gamma_1}^{(k)} + \widehat{Q_1}^{(k)} + \mathcal{N}_+^{(k)} - \mathcal{N}_-^{(k)}\,.} \tag{B.18}$$

$$\mathbf{1 \le \mathit{k} \le \mathit{N_s}}$$

B.1.2 Équation sur la masse

Poursuivons en intégrant sur l'espace des tailles l'équation sur la masse du système semi-cinétique :

$$\int_{I_s} \frac{\partial \overline{\alpha}(s)\,\rho_0}{\partial t}\,\mathrm{d}s + \int_{I_s} \nabla\cdot\left(\overline{\alpha}(s)\,\rho_0\,\overline{\boldsymbol{v}}(s)\right)\,\mathrm{d}s \;=\; \int_{I_s}\Big[\Gamma_2(s)+Q_2(s)\Big]\,\mathrm{d}s - \int_{I_s}\tau(s)\frac{\partial}{\partial s}\left(\overline{n}(s)\,\rho_0\overline{\mathcal{K}}(s)\right)\,\mathrm{d}s\,. \tag{B.19}$$

Comme précédemment, nous notons $\widehat{\Gamma_2}^{(k)}$ et $\widehat{Q_2}^{(k)}$ les termes de fragmentation et de coalescence intégrés sur un intervalle de taille $I_s^{(k)}$, et dont l'expression ne sera pas détaillée ici. En utilisant la relation (B.8), il vient après permutation des différents opérateurs :

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\left(\sum_{k=1}^{N_s} n^{(k)}\,\rho_0\int_{I_s^{(k)}}\tau(s)\phi_s^{(k)}(s)\,\mathrm{d}s\right) + \nabla\cdot\left(\sum_{k=1}^{N_s} n^{(k)}\,\rho_0\int_{I_s^{(k)}}\widetilde{\boldsymbol{v}}(s)\,\tau(s)\phi_s^{(k)}(s)\,\mathrm{d}s\right) &= \sum_{k=1}^{N_s}\left(\widehat{\Gamma_2}^{(k)}+\widehat{Q_2}^{(k)}\right)\\ &\quad - \sum_{k=1}^{N_s} n^{(k)}\,\rho_0\int_{I_s^{(k)}}\tau(s)\frac{\partial}{\partial s}\left(\phi_s^{(k)}(s)\,\overline{\mathcal{K}}(s)\right)\,\mathrm{d}s\,.\end{aligned} \tag{B.20}$$

Nous voyons apparaitre ici un second moment en taille [2] lié à la masse volumique des particules :

$$\boxed{\rho^{(k)}(t,\boldsymbol{x}) = n^{(k)}(t,\boldsymbol{x})\,\rho_0\int_{I_s^{(k)}}\tau(s)\phi_s^{(k)}(t,\boldsymbol{x},s)\,\mathrm{d}s\,.} \tag{B.21}$$

L'ordre de ce moment dépend du choix de la variable taille (moment d'ordre 1 en variable volume, d'ordre 3/2 en varaible surface, et d'ordre 3 en variable diamètre ou rayon). Par ailleurs, calculons à part l'intégrale du second membre de la relation (B.20), que l'on note I, via une intégration par parties :

$$I \;=\; \int_{I_s^{(k)}}\tau(s)\frac{\partial}{\partial s}\left(\phi_s^{(k)}(s)\,\overline{\mathcal{K}}(s)\right)\,\mathrm{d}s\,, \tag{B.22}$$

$$I \;=\; \Big[\tau(s)\,\phi_s^{(k)}(s)\,\overline{\mathcal{K}}(s)\Big]_{s_{k-1}}^{s_k} - \int_{I_s^{(k)}}\tau'(s)\phi_s^{(k)}(s)\,\overline{\mathcal{K}}(s)\,\mathrm{d}s\,, \tag{B.23}$$

$$I \;=\; \tau(s_k)\,\phi_s^{(k)}(s_k)\,\overline{\mathcal{K}}(s_k) - \tau(s_{k-1})\,\phi_s^{(k)}(s_{k-1})\,\overline{\mathcal{K}}(s_{k-1}) - \int_{I_s^{(k)}}\tau'(s)\phi_s^{(k)}(s)\,\overline{\mathcal{K}}(s)\,\mathrm{d}s\,. \tag{B.24}$$

Dans la dernière expression, $\tau'(s)$ désigne la dérivée du volume par rapport à la variable taille. Sans rompre la généricité des équations, nous allons maintenant introduire des notations utiles afin de faire le lien entre les termes précédents et les modèles qui permettent de les exprimer. Nous introduisons ainsi :

$$\boxed{\dot{m}_v^{(k)} = -\rho_0\int_{I_s^{(k)}}\tau'(s)\phi_s^{(k)}(s)\,\overline{\mathcal{K}}(s)\,\mathrm{d}s\,.} \tag{B.25}$$

Ce terme, qui s'exprime en kg.s^{-1}, correspond au débit massique à la surface d'une goutte intégré sur l'intervalle de taille $I_s^{(k)}$. Son expression est basée sur des modèles physiques établis à l'échelle d'une goutte et qui décrivent les transferts de masse (et donc la variation de taille) liés aux phénomènes d'évaporation et de condensation. De plus, on choisit arbitrairement d'ajouter un signe négatif afin de rendre le terme $\dot{m}_v$ positif en situation d'évaporation. On rappelle en effet que le terme $\mathcal{K}$ désigne directement la variation temporelle de la taille d'une goutte :

$$\mathcal{K} = \frac{\mathrm{d}\,s}{\mathrm{d}\,t}\,. \tag{B.26}$$

En situation d'évaporation, la taille diminue et donc le terme $\mathcal{K}$ est négatif. Par ailleurs, nous introduisons également les notations suivantes :

$$\boxed{\left\{\begin{array}{lcl}\mathcal{E}_+^{(k)} &=& -\rho_0\,\tau(s_k)\,\phi_s^{(k)}(s_k)\,\overline{\mathcal{K}}(s_k)\\ \mathcal{E}_-^{(k)} &=& -\rho_0\,\tau(s_{k-1})\,\phi_s^{(k)}(s_{k-1})\,\overline{\mathcal{K}}(s_{k-1})\end{array}\right.\,.} \tag{B.27}$$

2. Le premier moment en taille n'est autre que $n^{(k)}(t,\boldsymbol{x})$, relié à $\int_{I_s^{(k)}}\phi_s^{(k)}(t,\boldsymbol{x},s)\,\mathrm{d}s$, et qui constitue donc un moment d'ordre 0 en taille.

Ces deux termes représentent les flux de masse aux bornes de l'intervalle $I_s^{(k)}$ liés à l'évaporation. Finalement, l'équation générique sur la masse devient :

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\sum_{k=1}^{N_s}\rho^{(k)}\right)+\nabla\cdot\left(\sum_{k=1}^{N_s}n^{(k)}\rho_0\int_{I_s^{(k)}}\widetilde{\boldsymbol{v}}(s)\,\tau(s)\,\phi_s^{(k)}(s)\,\mathrm{d}s\right)=\sum_{k=1}^{N_s}\left(\widehat{\Gamma_2}^{(k)}+\widehat{Q_2}^{(k)}\right)+\sum_{k=1}^{N_s}n^{(k)}\left(\mathcal{E}_+^{(k)}-\mathcal{E}_-^{(k)}-\dot{m}_v^{(k)}\right). \quad \text{(B.28)}$$

Encore une fois, cela revient à résoudre N_s équations, et donc une notation allégée pour un intervalle de taille $I_s^{(k)}$ donne :

$$\boxed{\frac{\partial\rho^{(k)}}{\partial t}+\nabla\cdot\left(n^{(k)}\rho_0\int_{I_s^{(k)}}\widetilde{\boldsymbol{v}}(s)\,\tau(s)\,\phi_s^{(k)}(s)\,\mathrm{d}s\right)=\widehat{\Gamma_2}^{(k)}+\widehat{Q_2}^{(k)}+n^{(k)}\left(\mathcal{E}_+^{(k)}-\mathcal{E}_-^{(k)}-\dot{m}_v^{(k)}\right).} \quad \text{(B.29)}$$

$$\mathbf{1}\leq k\leq N_s$$

B.1.3 Équation sur la quantité de mouvement

Poursuivons en intégrant sur l'espace des tailles l'équation du système semi-cinétique sur la quantité de mouvement :

$$\begin{aligned}\int_{I_s}\frac{\partial\overline{\alpha}(s)\rho_0\widetilde{\boldsymbol{v}}(s)}{\partial t}\,\mathrm{d}s+\int_{I_s}\nabla\cdot\left[\overline{\alpha}(s)\rho_0\widetilde{\boldsymbol{v}}(s)\otimes\widetilde{\boldsymbol{v}}(s)+\boldsymbol{P}\right]\mathrm{d}s&=\int_{I_s}\left[\Gamma_3(s)+Q_3(s)\right]\mathrm{d}s\\&-\int_{I_s}\tau(s)\frac{\partial}{\partial s}\left(\overline{n}(s)\rho_0\widetilde{\mathcal{K}\boldsymbol{v}}(s)\right)\mathrm{d}s+\int_{I_s}\overline{\alpha}(s)\rho_0\widetilde{\mathcal{F}}(s)\,\mathrm{d}s. \quad \text{(B.30)}\end{aligned}$$

Comme expliqué en introduction de cette annexe, l'hypothèse monocinétique implique la nullité du tenseur $\boldsymbol{P}$ et permet d'écrire $\widetilde{\mathcal{K}\boldsymbol{v}}=\widetilde{\mathcal{K}}\widetilde{\boldsymbol{v}}$. De plus, une nouvelle notation utile est introduite de manière à faire le lien avec les modèles à l'échelle de la goutte. Il est en effet intéressant d'exprimer le terme de variation de la quantité de mouvement $\widetilde{\mathcal{F}}$ sous une forme plus pertinente. On rappelle (cf. relation (3.43) et les commentaires qui la succèdent) que $\widetilde{\mathcal{F}}$ désigne la force de traînée massique (N/kg), jugée prépondérante dans les variations de quantité de mouvement subies par les gouttes. Or, les modèles à l'échelle de la goutte fournissent généralement la force de traînée en newton (cf. § 7.1). Si l'on note $\boldsymbol{F_{dr}}^{(k)}$ le vecteur de la force de traînée subie par une goutte, exprimé en newton et intégré sur un intervalle de taille $I_s^{(k)}$, alors nous avons :

$$\boxed{\boldsymbol{F_{dr}}^{(k)}=\rho_0\int_{I_s^{(k)}}\tau(s)\phi_s^{(k)}(s)\,\widetilde{\mathcal{F}}(s)\,\mathrm{d}s\,.} \quad \text{(B.31)}$$

Il vient alors :

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\left(\sum_{k=1}^{N_s}n^{(k)}\rho_0\int_{I_s^{(k)}}\widetilde{\boldsymbol{v}}(s)\,\tau(s)\phi_s^{(k)}(s)\,\mathrm{d}s\right)+\nabla\cdot\left(\sum_{k=1}^{N_s}n^{(k)}\rho_0\int_{I_s^{(k)}}\widetilde{\boldsymbol{v}}(s)\otimes\widetilde{\boldsymbol{v}}(s)\,\tau(s)\phi_s^{(k)}(s)\,\mathrm{d}s\right)&=\sum_{k=1}^{N_s}\left(\widehat{\Gamma_3}^{(k)}+\widehat{Q_3}^{(k)}\right)\\&-\sum_{k=1}^{N_s}n^{(k)}\rho_0\int_{I_s^{(k)}}\tau(s)\frac{\partial}{\partial s}\left(\phi_s^{(k)}(s)\widetilde{\mathcal{K}}(s)\widetilde{\boldsymbol{v}}(s)\right)\mathrm{d}s+\sum_{k=1}^{N_s}n^{(k)}\,\boldsymbol{F_{dr}}^{(k)}. \quad \text{(B.32)}\end{aligned}$$

Calculons à part l'intégrale du second membre, que l'on note I, via une intégration par parties :

$$I=\int_{I_s^{(k)}}\tau(s)\frac{\partial}{\partial s}\left(\phi_s^{(k)}(s)\widetilde{\mathcal{K}}(s)\widetilde{\boldsymbol{v}}(s)\right)\mathrm{d}s\,, \quad \text{(B.33)}$$

$$I=\left[\tau(s)\,\phi_s^{(k)}(s)\widetilde{\mathcal{K}}(s)\widetilde{\boldsymbol{v}}(s)\right]_{s_{k-1}}^{s_k}-\int_{I_s^{(k)}}\tau'(s)\phi_s^{(k)}(s)\widetilde{\mathcal{K}}(s)\widetilde{\boldsymbol{v}}(s)\,\mathrm{d}s\,, \quad \text{(B.34)}$$

$$I=\tau(s_k)\,\phi_s^{(k)}(s_k)\widetilde{\mathcal{K}}(s_k)\widetilde{\boldsymbol{v}}(s_k)-\tau(s_{k-1})\,\phi_s^{(k)}(s_{k-1})\widetilde{\mathcal{K}}(s_{k-1})\widetilde{\boldsymbol{v}}(s_{k-1})-\int_{I_s^{(k)}}\tau'(s)\phi_s^{(k)}(s)\widetilde{\mathcal{K}}(s)\widetilde{\boldsymbol{v}}(s)\,\mathrm{d}s\,. \quad \text{(B.35)}$$

Il apparait alors les deux termes d'évaporation $\mathcal{E}_+^{(k)}$ et $\mathcal{E}_-^{(k)}$. En revanche, le troisième terme d'évaporation $\dot{m}_v^{(k)}$ ne peut pas être isolé à ce stade, en raison de la présence du terme de vitesse $\widetilde{\boldsymbol{v}}(s)$ dans l'intégrale. Finalement, nous

obtenons l'équation générique suivante pour la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\sum_{k=1}^{N_s} n^{(k)}\rho_0 \int_{I_s^{(k)}} \widetilde{\boldsymbol{v}}(s)\,\tau(s)\phi_s^{(k)}(s)\,\mathrm{d}s\right) + \nabla\cdot\left(\sum_{k=1}^{N_s} n^{(k)}\rho_0 \int_{I_s^{(k)}} \widetilde{\boldsymbol{v}}(s)\otimes\widetilde{\boldsymbol{v}}(s)\,\tau(s)\phi_s^{(k)}(s)\,\mathrm{d}s\right) = \sum_{k=1}^{N_s}\left(\widehat{\Gamma_3}^{(k)} + \widehat{Q_3}^{(k)}\right)$$
$$+ \sum_{k=1}^{N_s} n^{(k)}\left(\mathcal{E}_+^{(k)}\widetilde{\boldsymbol{v}}(s_k) - \mathcal{E}_-^{(k)}\widetilde{\boldsymbol{v}}(s_{k-1}) - \rho_0\int_{I_s^{(k)}}\tau'(s)\phi_s^{(k)}(s)\,\widetilde{\mathcal{K}}(s)\widetilde{\boldsymbol{v}}(s)\,\mathrm{d}s\right) + \sum_{k=1}^{N_s} n^{(k)}\,\boldsymbol{F_{dr}}^{(k)}\,. \quad \text{(B.36)}$$

Cela revient à résoudre N_s équations, et donc une notation allégée pour un seul intervalle de taille $I_s^{(k)}$ donne :

$$\boxed{\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\left(n^{(k)}\rho_0 \int_{I_s^{(k)}} \widetilde{\boldsymbol{v}}(s)\,\tau(s)\phi_s^{(k)}(s)\,\mathrm{d}s\right) + \nabla\cdot\left(n^{(k)}\rho_0 \int_{I_s^{(k)}} \widetilde{\boldsymbol{v}}(s)\otimes\widetilde{\boldsymbol{v}}(s)\,\tau(s)\phi_s^{(k)}(s)\,\mathrm{d}s\right) &= \widehat{\Gamma_3}^{(k)} + \widehat{Q_3}^{(k)}\\ + n^{(k)}\left(\mathcal{E}_+^{(k)}\widetilde{\boldsymbol{v}}(s_k) - \mathcal{E}_-^{(k)}\widetilde{\boldsymbol{v}}(s_{k-1}) - \rho_0\int_{I_s^{(k)}}\tau'(s)\phi_s^{(k)}(s)\,\widetilde{\mathcal{K}}(s)\widetilde{\boldsymbol{v}}(s)\,\mathrm{d}s\right) + n^{(k)}\,\boldsymbol{F_{dr}}^{(k)}\,.\end{aligned}} \quad \text{(B.37)}$$

$$\boldsymbol{1 \le k \le N_s}$$

B.1.4 Équation sur l'énergie interne

Pour terminer, intégrons sur l'espace des tailles l'équation du système semi-cinétique sur l'énergie interne :

$$\int_{I_s}\frac{\partial\overline{\alpha}(s)\rho_0\widetilde{e}(s)}{\partial t}\,\mathrm{d}s + \int_{I_s}\nabla\cdot\left[\overline{\alpha}(s)\rho_0\widetilde{\boldsymbol{v}}(s)\widetilde{e}(s)\right]\mathrm{d}s = \int_{I_s}\Big[\Gamma_4(s) + Q_4(s)\Big]\mathrm{d}s$$
$$- \int_{I_s}\tau(s)\frac{\partial}{\partial s}\left(\overline{n}(s)\rho_0\widetilde{\mathcal{K}e}(s)\right)\mathrm{d}s + \int_{I_s}\overline{\alpha}(s)\rho_0\,\widetilde{c_p\mathcal{R}}(s)\,\mathrm{d}s\,. \quad \text{(B.38)}$$

Notons que l'énergie interne moyenne (au niveau semi-cinétique) dépend de la taille via l'hypothèse de monodispersion de la température :

$$\widetilde{e}(s) = e\left(\widetilde{\theta}(s)\right)\,. \quad \text{(B.39)}$$

Les étapes de calcul consécutives à l'équation (B.38) sont semblables à celles de l'équation sur la quantité de mouvement. L'hypothèse de monodispersion en température permet d'écrire $\widetilde{\mathcal{K}e} = \widetilde{\mathcal{K}}\widetilde{e}$. De plus, une notation utile est introduite pour le terme de variation de la température $\widetilde{c_p\mathcal{R}}$, de manière à faire le lien avec les modèles à l'échelle de la goutte. Les variations de température des gouttes sont dues au flux de chauffage des gouttes, généralement noté Φ_c et qui s'exprime en watt (cf. § 7.1)[3]. Le terme $\widetilde{c_p\mathcal{R}}$ est lui homogène à une puissance massique (W/kg). Nous posons alors :

$$\Phi_c^{(k)} = \rho_0\int_{I_s^{(k)}}\tau(s)\,\phi_s^{(k)}(s)\,\widetilde{c_p\mathcal{R}}(s)\,\mathrm{d}s\,. \quad \text{(B.40)}$$

Comme pour la quantité de mouvement, la forme finale de l'équation fait apparaitre les deux termes d'évaporation $\mathcal{E}_+^{(k)}$ et $\mathcal{E}_-^{(k)}$ mais pas le terme $\dot{m}_v^{(k)}$. Celui-ci ne peut pas être isolé à ce stade en raison de la présence du terme d'énergie interne $\widetilde{e}(s)$ dans l'intégrale. Finalement, nous obtenons l'équation générique suivante pour l'énergie interne :

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\sum_{k=1}^{N_s} n^{(k)}\rho_0 \int_{I_s^{(k)}} \widetilde{e}(s)\,\tau(s)\phi_s^{(k)}(s)\,\mathrm{d}s\right) + \nabla\cdot\left(\sum_{k=1}^{N_s} n^{(k)}\rho_0 \int_{I_s^{(k)}} \widetilde{\boldsymbol{v}}(s)\widetilde{e}(s)\,\tau(s)\phi_s^{(k)}(s)\,\mathrm{d}s\right) = \sum_{k=1}^{N_s}\left(\widehat{\Gamma_4}^{(k)} + \widehat{Q_4}^{(k)}\right)$$
$$+ \sum_{k=1}^{N_s} n^{(k)}\left(\mathcal{E}_+^{(k)}\widetilde{e}(s_k) - \mathcal{E}_-^{(k)}\widetilde{e}(s_{k-1}) - \rho_0\int_{I_s^{(k)}}\tau'(s)\phi_s^{(k)}(s)\,\widetilde{\mathcal{K}}(s)\widetilde{e}(s)\,\mathrm{d}s\right) + \sum_{k=1}^{N_s} n^{(k)}\,\Phi_c^{(k)}\,. \quad \text{(B.41)}$$

Cela revient toujours à résoudre N_s équations, et donc une notation allégée pour un seul intervalle de taille $I_s^{(k)}$ donne :

3. Ce flux de chauffage est exactement le flux de chaleur cédé par la phase gazeuse dans le cas de particules inertes. Lorsque les particules évaporent, le flux de chauffage ne constitue qu'une partie du flux de chaleur cédé par le gaz, l'autre partie étant utilisée sous forme de chaleur latente d'évaporation.

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(n^{(k)}\rho_0\int_{I_s^{(k)}}\widetilde{e}(s)\,\tau(s)\phi_s^{(k)}(s)\,\mathrm{d}s\right)+\nabla\cdot\left(n^{(k)}\rho_0\int_{I_s^{(k)}}\widetilde{v}(s)\,\widetilde{e}(s)\,\tau(s)\phi_s^{(k)}(s)\,\mathrm{d}s\right)=\widehat{\Gamma_4}^{(k)}+\widehat{Q_4}^{(k)}$$
$$+n^{(k)}\left(\mathcal{E}_+^{(k)}\widetilde{e}(s_k)-\mathcal{E}_-^{(k)}\widetilde{e}(s_{k-1})-\rho_0\int_{I_s^{(k)}}\tau'(s)\phi_s^{(k)}(s)\,\widetilde{\mathcal{K}}(s)\,\widetilde{e}(s)\,\mathrm{d}s\right)+n^{(k)}\,\Phi_c^{(k)}\,. \tag{B.42}$$

$$\mathbf{1}\leq k\leq N_s$$

B.1.5 Système d'équations générique

Finalement, un système d'équations générique est obtenu pour chaque intervalle de taille $I_s^{(k)}$, en regroupant les équations de conservation (B.18) , (B.29), (B.37) et (B.42), portant respectivement sur la densité volumique en nombre de gouttes, la masse, la quantité de mouvement et l'énergie interne. Dans la suite, nous nous intéressons à des cas particuliers de discrétisation de l'espace des tailles et de description des distributions. Ces cas particuliers permettent de retrouver les équations de conservation finales de modèles classiques de la littérature.

B.2 Modèle bi-fluide

L'approche bi-fluide constitue l'extension directe à la variable taille des hypothèses de monodispersion en vitesse et température. Toutes les gouttes situées à un instant t au voisinage du point $\boldsymbol{x}$ sont supposées avoir la même taille moyenne $\overline{s}$. La distribution locale des tailles est ainsi représentée sous la forme d'une distribution de Dirac. Si l'on se rattache au formalisme que nous avons défini en introduction de cette annexe (cf. Figure B.1), l'approche bi-fluide correspond au cas particulier où $N_s = 1$ (un seul intervalle pour représenter l'ensemble de l'espace des tailles), et où l'unique fonction densité de probabilité est représentée sous la forme d'une distribution de Dirac (cf. Figure B.2), c'est-à-dire, en omettant l'exposant k devenu inutile :

$$\overline{n}(t,\boldsymbol{x},s)=n(t,\boldsymbol{x})\,\phi_s(t,\boldsymbol{x},s)=n(t,\boldsymbol{x})\,\delta\left(s-\overline{s}(t,\boldsymbol{x})\right)\,. \tag{B.43}$$

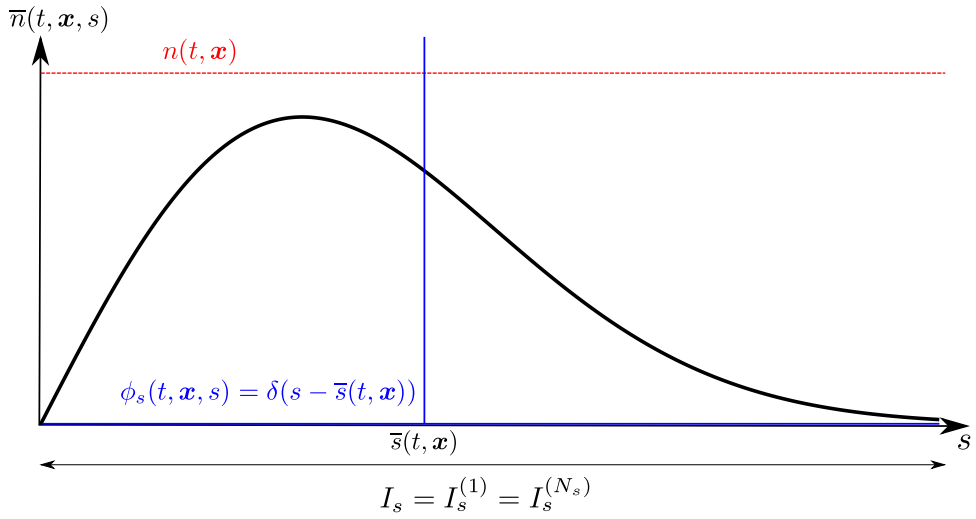


FIGURE B.2 – ***Représentation de l'espace des tailles dans le modèle bi-fluide.***

Sous ces hypothèses, il est maintenant possible de réexprimer un certain nombre des termes qui apparaissent dans les équations génériques établies aux paragraphes précédents. En effet, par propriété de la distribution de Dirac, nous avons pour toute fonction $\varphi(s)$:

$$\int_{I_s}\varphi(s)\,\delta\left(s-\overline{s}\right)\,\mathrm{d}s=\varphi(\overline{s})\,. \tag{B.44}$$

Il vient donc en particulier :

$$\left\{\begin{array}{lcl} n\displaystyle\int_{I_s}\overline{\boldsymbol{v}}(s)\,\delta\,(s-\overline{s})\;\mathrm{d}s & = & n\,\overline{\boldsymbol{v}}(\overline{s}) \\ n\,\rho_0\displaystyle\int_{I_s}\widetilde{\boldsymbol{v}}(s)\,\tau(s)\,\delta\,(s-\overline{s})\;\mathrm{d}s & = & \alpha\,\rho_0\,\widetilde{\boldsymbol{v}}(\overline{s}) \\ n\,\rho_0\displaystyle\int_{I_s}\widetilde{\boldsymbol{v}}(s)\otimes\widetilde{\boldsymbol{v}}(s)\,\tau(s)\,\delta\,(s-\overline{s})\;\mathrm{d}s & = & \alpha\,\rho_0\,\widetilde{\boldsymbol{v}}(\overline{s})\otimes\widetilde{\boldsymbol{v}}(\overline{s}) \\ n\,\rho_0\displaystyle\int_{I_s}\widetilde{\boldsymbol{v}}(s)\,\widetilde{e}(s)\,\tau(s)\,\delta\,(s-\overline{s})\;\mathrm{d}s & = & \alpha\,\rho_0\,\widetilde{\boldsymbol{v}}(\overline{s})\,\widetilde{e}(\overline{s}) \end{array}\right. \tag{B.45}$$

De plus, les bornes s_{k-1} et s_k sont ici les bornes de l'espace des tailles, c'est-à-dire respectivement 0 et $+\infty$. Il vient donc immédiatement la nullité des termes d'échanges aux bornes :

$$\mathcal{N}_+^{(1)} = \mathcal{N}_-^{(1)} = \mathcal{E}_+^{(1)} = \mathcal{E}_-^{(1)} = 0\,. \tag{B.46}$$

Les expressions génériques des autres termes sources, données dans les paragraphes précédents, se simplifient ici en

$$\left\{\begin{array}{lcccl} \dot{m}_v & = & -\rho_0\displaystyle\int_{I_s}\tau'(s)\,\delta\,(s-\overline{s})\;\overline{\mathcal{K}}(s)\,\mathrm{d}s & = & -\rho_0\,\tau'(\overline{s})\,\overline{\mathcal{K}}\,(\overline{s}) \\ \boldsymbol{F_{dr}} & = & \rho_0\displaystyle\int_{I_s}\tau(s)\,\delta\,(s-\overline{s})\;\widetilde{\mathcal{F}}(s)\,\mathrm{d}s & = & \rho_0\,\tau(\overline{s})\,\widetilde{\mathcal{F}}\,(\overline{s}) \\ \Phi_c & = & \rho_0\displaystyle\int_{I_s}\tau(s)\,\delta\,(s-\overline{s})\;\widetilde{c_p\mathcal{R}}(s)\,\mathrm{d}s & = & \rho_0\,\tau(\overline{s})\,\widetilde{c_p\mathcal{R}}\,(\overline{s}) \end{array}\right. \tag{B.47}$$

Enfin, les termes sources liés à la fragmentation et à la coalescence, $\widehat{\Gamma_1}$, $\widehat{\Gamma_2}$, $\widehat{\Gamma_3}$, $\widehat{\Gamma_4}$, et $\widehat{Q_1}$, $\widehat{Q_2}$, $\widehat{Q_3}$, $\widehat{Q_4}$, doivent être négligés à défaut de pouvoir être modélisés. En effet, la description de ces phénomènes est intrinsèquement incompatible avec la vision localement monodisperse de l'approche bi-fluide. Finalement, le système d'équations obtenu pour le modèle bi-fluide s'écrit :

$$\left\{\begin{array}{lcccl} \dfrac{\partial n}{\partial t} & + & \nabla\cdot\left(n\overline{\boldsymbol{v}}\right) & = & 0 \\ \dfrac{\partial \alpha\,\rho_0}{\partial t} & + & \nabla\cdot\left(\alpha\,\rho_0\,\widetilde{\boldsymbol{v}}\right) & = & -n\,\dot{m}_v \\ \dfrac{\partial \alpha\,\rho_0\,\widetilde{\boldsymbol{v}}}{\partial t} & + & \nabla\cdot\left(\alpha\,\rho_0\,\widetilde{\boldsymbol{v}}\otimes\widetilde{\boldsymbol{v}}\right) & = & -n\,\dot{m}_v\,\widetilde{\boldsymbol{v}} \quad + \quad n\,\boldsymbol{F_{dr}} \\ \dfrac{\partial \alpha\,\rho_0\,\widetilde{e}}{\partial t} & + & \nabla\cdot\left(\alpha\,\rho_0\,\widetilde{e}\,\widetilde{\boldsymbol{v}}\right) & = & -n\,\dot{m}_v\,\widetilde{e} \quad + \quad n\,\Phi_c \end{array}\right. \tag{B.48}$$

B.3 Méthode multi-classes

La méthode multi-classes constitue une extension polydisperse du modèle bi-fluide. La distribution locale des tailles n'est plus représentée par une unique distribution de Dirac, mais elle est échantillonnée en un certain nombre de distributions de Dirac. La dénomination de ***classe*** est employée pour désigner un échantillon de la fonction de distribution, et on note N_c le nombre total de classes. Comme dans l'approche bi-fluide, chaque classe j est caractérisée par une seule taille moyenne $\overline{s}_{[j]}$, une seule vitesse moyenne $\overline{\boldsymbol{v}}_{[j]}$ et une seule seule température moyenne $\overline{\theta}_{[j]}$.

Il faut bien comprendre que la méthode multi-classe a été développée à l'origine à partir de considérations macroscopiques, sans dérivation formelle depuis le niveau cinétique. Lorsque l'on cherche à apporter une justification des équations de la méthode multi-classes en faisant le lien avec le niveau cinétique, on met en évidence un point important : ***les équations de conservation décrivant une classe donnée doivent s'interpréter comme étant issues d'une équation cinétique propre à cette classe***. A ce titre, des classes différentes peuvent très bien caractériser

un ensemble de particules de nature différente (propriétés thermodynamiques par exemple). Evidemment, dans la pratique le but est généralement de décrire des particules de même nature.

Ceci a une conséquence immédiate : ***les classes sont formellement indépendantes les unes des autres***. Ainsi, si dans un calcul, on définit plusieurs classes, chacune décrite initialement par un diamètre différent en un point de l'espace donné, alors ces diamètres moyens vont évoluer indépendamment les uns des autres. Leurs valeurs peuvent donc se rejoindre ou se croiser, sans qu'il n'y ait pourtant d'interaction possible entre ces gouttes. Cependant, une interaction indirecte entre les classes existe tout de même par l'intermédiaire de la phase gazeuse, lorsque les classes sont couplées en mode "two-way" avec le gaz. Autrement formulé, la méthode multi-classes consiste à simuler plusieurs processus parallèles de la méthode bi-fluide, pour décrire "plusieurs" phases dispersées ne se voyant pas directement les unes les autres, mais qui sont toutes couplées à la même phase gazeuse. La distribution locale des tailles est donc représentée sous la forme d'une distribution de Dirac unique dans chaque classe j (cf. Figure B.3). Il n'y a pas de discrétisation de l'espace des tailles I_s à proprement parler ($k = N_s = 1$).

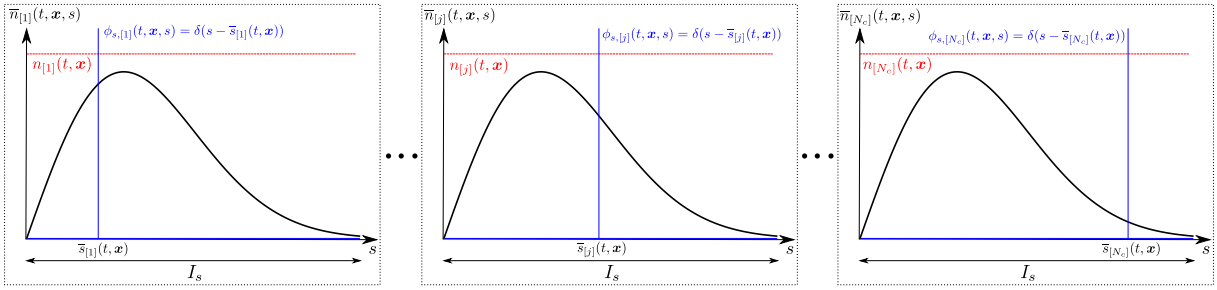


FIGURE B.3 – ***Représentation de l'espace des tailles dans le modèle multi-classes.***

Finalement, le système d'équations obtenu pour une classe j dans le modèle multi-classes est donné en (B.49). Il est en tout point similaire au système (B.48) du modèle bi-fluide, en ajoutant simplement l'indice j pour désigner les grandeurs propres à chaque classe.

$$1 \leq j \leq N_c, \quad \begin{cases} \dfrac{\partial n_{[j]}}{\partial t} + \nabla\cdot\left(n_{[j]}\overline{\boldsymbol{v}}_{[j]}\right) = 0 \\ \dfrac{\partial \alpha_{[j]}\rho_{0,[j]}}{\partial t} + \nabla\cdot\left(\alpha_{[j]}\rho_{0,[j]}\widetilde{\boldsymbol{v}}_{[j]}\right) = -n_{[j]}\dot{m}_{v,[j]} \\ \dfrac{\partial \alpha_{[j]}\rho_{0,[j]}\widetilde{\boldsymbol{v}}_{[j]}}{\partial t} + \nabla\cdot\left(\alpha_{[j]}\rho_{0,[j]}\widetilde{\boldsymbol{v}}_{[j]}\otimes\widetilde{\boldsymbol{v}}_{[j]}\right) = -n_{[j]}\dot{m}_{v,[j]}\widetilde{\boldsymbol{v}}_{[j]} + n_{[j]}\boldsymbol{F_{dr}}_{[j]} \\ \dfrac{\partial \alpha_{[j]}\rho_{0,[j]}\widetilde{e}_{[j]}}{\partial t} + \nabla\cdot\left(\alpha_{[j]}\rho_{0,[j]}\widetilde{e}_{[j]}\widetilde{\boldsymbol{v}}_{[j]}\right) = -n_{[j]}\dot{m}_{v,[j]}\widetilde{e}_{[j]} + n_{[j]}\Phi_{c,[j]} \end{cases} \tag{B.49}$$

A noter qu'il y a bien une masse volumique thermodynamique ρ_0 par classe. En effet, la loi d'état en elle-même peut être spécifique à chaque classe, puisque les classes sont indépendantes. D'autre part, même dans le cas d'une loi d'état commune, puisque nous avons une température moyenne spécifique à chaque classe, il en est de même de ρ_0 :

$$\rho_0 = \rho_0\left(\overline{\theta}_{[j]}\right) = \rho_{0,[j]}\,. \tag{B.50}$$

B.4 Méthodes sectionnelles

A la différence des approches précédentes (bi-fluide et multi-classes), l'objectif des méthodes sectionnelles est d'apporter une ***description continue (au moins par morceaux) de la distribution en taille***, via une discrétisation en un nombre fini d'intervalles appelés ***sections***, dont les bornes sont fixes et pré-définies. Il s'agit donc précisément du formalisme introduit dans cette annexe (cf. Figure B.1), lequel conduit, après intégration du système semi-cinétique sur l'espace des tailles, aux équations de la section § B.1. Pour obtenir la forme finale des équations, il ne reste qu'à proposer la forme des fonctions de distribution normalisées $\phi_s^{(k)}$ dans chaque section.

B.4.1 Hypothèse sur la forme des fonctions de distribution

Plusieurs choix sont possibles et conduisent à différentes méthodes classiques présentées dans la littérature. La Figure B.4 présente trois choix possibles de fonctions de distribution exprimées en la variable taille s :

– la méthode sectionnelle d'ordre 1, c'est-à-dire avec des fonctions de distribution constantes par section :

$$\phi_s^{(k)}(t, \boldsymbol{x}, s) = c^{(k)} \, . \tag{B.51}$$

On note tout de même que la dernière section ne peut pas être décrite de cette manière puisque le nombre de gouttes doit tendre vers zéro quand leur taille tend vers l'infini. Par ailleurs, on montre que le coefficient $c^{(k)}$ ne dépend pas de t et de $\boldsymbol{x}$ mais seulement des bornes de la section k (cf. § B.4.3).

– la méthode sectionnelle d'ordre 2 avec reconstruction affine, où la fonction de distribution est du type [4] :

$$\phi_s^{(k)}(t, \boldsymbol{x}, s) = a^{(k)}(t, \boldsymbol{x}) + b^{(k)}(t, \boldsymbol{x}) s \, . \tag{B.52}$$

– la méthode sectionnelle d'ordre 2 avec reconstruction exponentielle, où la fonction de distribution est du type :

$$\phi_s^{(k)}(t, \boldsymbol{x}, s) = a^{(k)}(t, \boldsymbol{x}) \exp\left(-b^{(k)}(t, \boldsymbol{x}) s\right) \, . \tag{B.53}$$

Les coefficients $a^{(k)}$ et $b^{(k)}$ ou $c^{(k)}$ de la reconstruction dans chaque section sont obtenus par inversion des relations qui les relient aux moments en taille, $n^{(k)}$ et $\rho^{(k)}$, connus par ailleurs grâce à la résolution de leurs équations de conservation respectives (voir ci-dessous en § B.4.3).

B.4.2 Système d'équations des méthodes sectionnelles

Reformulons maintenant les équations génériques établies en § B.1 dans le cas particulier de l'approche sectionnelle. Pour cela, il convient de formuler une hypothèse supplémentaire, qui vient renforcer l'hypothèse de monodispersion en vitesse et température :

Dans chaque section k, la vitesse et la température (donc l'énergie interne également) sont supposées indépendantes de la variable taille et sont donc constantes :

$$\begin{aligned}
\overline{\boldsymbol{v}}(t, \boldsymbol{x}, s) &= \overline{\boldsymbol{v}}^{(k)}(t, \boldsymbol{x}) \quad \text{si } s \in I_s^{(k)} \\
\widetilde{\boldsymbol{v}}(t, \boldsymbol{x}, s) &= \widetilde{\boldsymbol{v}}^{(k)}(t, \boldsymbol{x}) \quad \text{si } s \in I_s^{(k)} \\
\widetilde{\theta}(t, \boldsymbol{x}, s) &= \widetilde{\theta}^{(k)}(t, \boldsymbol{x}) \quad \text{si } s \in I_s^{(k)} \\
\widetilde{e}(t, \boldsymbol{x}, s) &= \widetilde{e}^{(k)}(t, \boldsymbol{x}) \quad \text{si } s \in I_s^{(k)}
\end{aligned} \tag{B.54}$$

Cette hypothèse est plus forte que l'hypothèse de monodispersion, vers laquelle elle tend si la taille des sections tend vers zéro. Elle est néanmoins nécessaire afin de faire sortir la vitesse et l'énergie interne de certaines intégrales des équations génériques, et ainsi faire réapparaitre le moment en taille $\rho^{(k)}(t, \boldsymbol{x})$ défini par la relation (B.21), et le terme d'évaporation $\dot{m}_v^{(k)}$ défini par la relation (B.25). Ce faisant, le système d'équations que l'on obtient pour une section k quelconque, quelle que soit la forme des distributions dans chaque section, est donné en (B.56). On note que sous l'hypothèse précédente et avec la définition des sections $I_s^{(k)} = [s_{k-1}, s_k[$, excluant les bornes supérieures, nous avons :

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \widetilde{\boldsymbol{v}}(s_k) &=& \widetilde{\boldsymbol{v}}^{(k+1)} \\ \widetilde{\boldsymbol{v}}(s_{k-1}) &=& \widetilde{\boldsymbol{v}}^{(k)} \end{array} \right. \qquad \left\{ \begin{array}{lcl} \widetilde{e}(s_k) &=& \widetilde{e}^{(k+1)} \\ \widetilde{e}(s_{k-1}) &=& \widetilde{e}^{(k)} \end{array} \right. \tag{B.55}$$

4. En réalité, la reconstruction affine en variable surface développée par SIBRA [251] utilise quatre paramètres (voir le paragraphe § 11.6 du Chapitre 11 pour plus de détails).

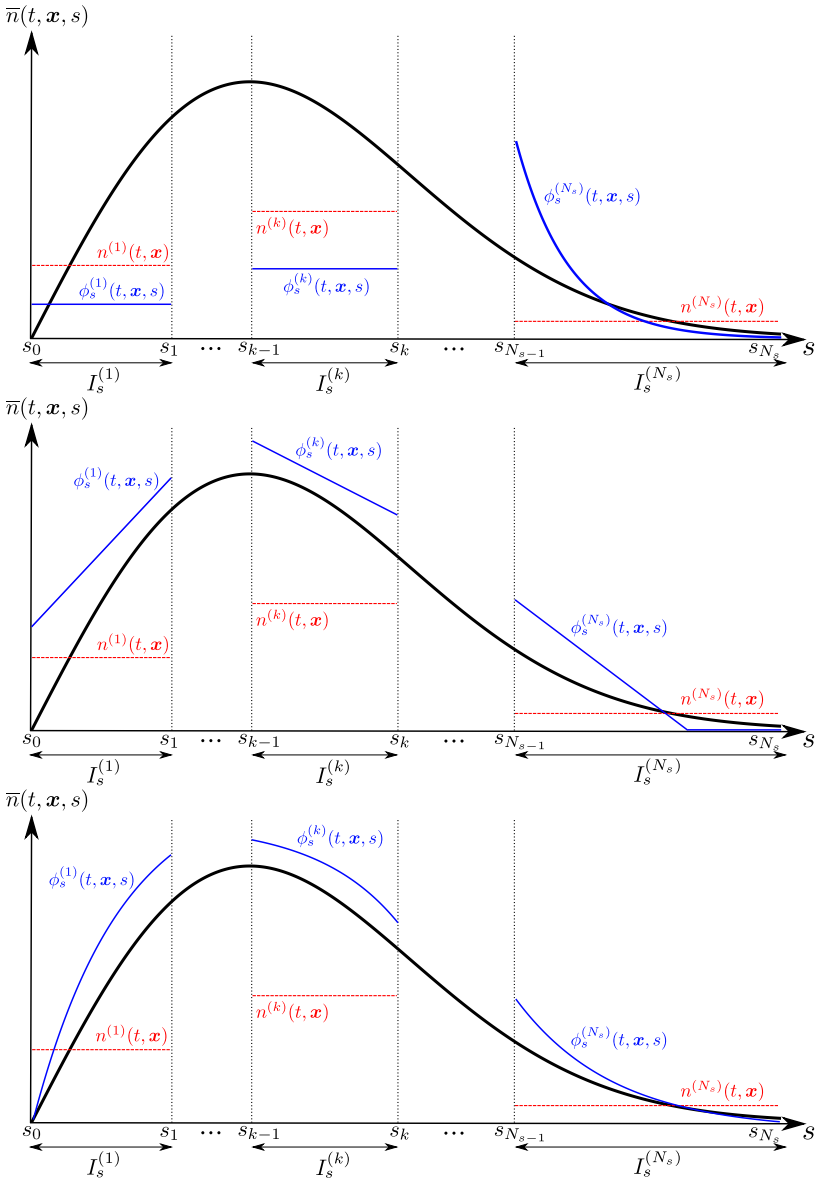


FIGURE B.4 – ***Différentes représentations de l'espace des tailles dans la méthode sectionnelle : constante par morceaux, affine ou exponentielle.***

$$
\left\{
\begin{array}{lcll}
\dfrac{\partial n^{(k)}}{\partial t} & + \nabla\cdot\left(n^{(k)}\widetilde{\boldsymbol{v}}^{(k)}\right) & = & \widehat{\Gamma_1}^{(k)} + \widehat{Q_1}^{(k)} + \mathcal{N}_+^{(k)} - \mathcal{N}_-^{(k)} \\
\dfrac{\partial \alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}}{\partial t} & + \nabla\cdot\left(\alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}\widetilde{\boldsymbol{v}}^{(k)}\right) & = & \widehat{\Gamma_2}^{(k)} + \widehat{Q_2}^{(k)} + n^{(k)}\left(\mathcal{E}_+^{(k)} - \mathcal{E}_-^{(k)} - \dot{m}_v^{(k)}\right) \\
\dfrac{\partial \alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}\widetilde{\boldsymbol{v}}^{(k)}}{\partial t} & + \nabla\cdot\left(\alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}\widetilde{\boldsymbol{v}}^{(k)}\otimes\widetilde{\boldsymbol{v}}^{(k)}\right) & = & \widehat{\Gamma_3}^{(k)} + \widehat{Q_3}^{(k)} + n^{(k)}\,\boldsymbol{F_{dr}}^{(k)} \\
 & & + & n^{(k)}\left(\widetilde{\boldsymbol{v}}^{(k+1)}\mathcal{E}_+^{(k)} - \widetilde{\boldsymbol{v}}^{(k)}\mathcal{E}_-^{(k)} - \widetilde{\boldsymbol{v}}^{(k)}\dot{m}_v^{(k)}\right) \\
\dfrac{\partial \alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}\widetilde{e}^{(k)}}{\partial t} & + \nabla\cdot\left(\alpha^{(k)}\rho_0^{(k)}\widetilde{e}^{(k)}\widetilde{\boldsymbol{v}}^{(k)}\right) & = & \widehat{\Gamma_4}^{(k)} + \widehat{Q_4}^{(k)} + n^{(k)}\,\Phi_c^{(k)} \\
 & & + & n^{(k)}\left(\widetilde{e}^{(k+1)}\mathcal{E}_+^{(k)} - \widetilde{e}^{(k)}\mathcal{E}_-^{(k)} - \widetilde{e}^{(k)}\dot{m}_v^{(k)}\right)
\end{array}
\right. \tag{B.56}
$$

$$\mathbf{1 \leq k \leq N_s}$$

Notons que dans les cas particuliers de la première section ($k = 1$ et $s_{k-1} = 0$), et de la dernière section ($k = N_s$ et $s_k = +\infty$), les termes suivants sont nuls :

$$\mathcal{N}_-^{(1)} = \mathcal{N}_+^{(N_s)} = \mathcal{E}_-^{(1)} = \mathcal{E}_+^{(N_s)} = 0\,. \tag{B.57}$$

B.4.3 Détermination des coefficients de la fonction de distribution

Il est important de bien comprendre que l'intérêt des méthodes sectionnelles ***réside essentiellement dans une meilleure précision de l'évaluation des termes sources***. Que ce soit les termes sources d'interaction entre gouttes (fragmentation et coalescence), qui par essence nécessitent une description polydisperse, ou que ce soit les termes sources de couplage avec la phase gazeuse. En effet, les taux de transferts de masse, de quantité de mouvement, et d'énergie, dépendent tous de la taille des gouttes. Aussi, lorsque l'on a à traiter des écoulements fortement polydispersés, pouvoir calculer des termes sources moyens, intégrés sur la variable taille, apporte une amélioration certaine par rapport aux modèles qui évaluent ces termes sources pour une seule taille moyenne. Pour pouvoir calculer ces termes sources moyens, intégrés sur les sections, il faut connaitre les fonctions de distribution $\phi_s^{(k)}$ dans chaque section, ce qui revient, une fois postulée leur forme, à connaitre leurs coefficients ($a^{(k)}$ et $b^{(k)}$ ou $c^{(k)}$). Pour cela, il suffit d'inverser les relations de définition des moments $n^{(k)}$ et $\rho^{(k)}$.

Sectionnel d'ordre 1

Considérons le cas de la fonction de distribution (B.51), et cherchons à déterminer le coefficient $c^{(k)}$ (valeur constante de la fonction de distribution dans chaque section). Pour cela, il suffit d'inverser au choix la relation de normalisation (B.3) à laquelle est reliée le moment $n^{(k)}$:

$$\int_{s_{k-1}}^{s_k} \phi_s^{(k)}(t,\boldsymbol{x},s)\,\mathrm{d}s = 1 \quad\Longrightarrow\quad c^{(k)}\int_{s_{k-1}}^{s_k}\mathrm{d}s = 1 \quad\Longrightarrow\quad c^{(k)} = \frac{1}{s_k - s_{k-1}}\,, \tag{B.58}$$

ou bien la relation (B.21) de définition du moment $\rho^{(k)}$:

$$\rho^{(k)}(t,\boldsymbol{x}) = n^{(k)}(t,\boldsymbol{x})\,\rho_0\int_{s_{k-1}}^{s_k}\tau(s)\phi_s^{(k)}(t,\boldsymbol{x},s)\,\mathrm{d}s \quad\Longrightarrow\quad c^{(k)} = \frac{\rho^{(k)}(t,\boldsymbol{x})}{\rho_0^{(k)}n^{(k)}(t,\boldsymbol{x})}\frac{1}{\displaystyle\int_{s_{k-1}}^{s_k}\tau(s)\,\mathrm{d}s}\,. \tag{B.59}$$

Dans le second cas, si l'on choisit de travailler en variable volume ($s = \tau$), alors il vient

$$\int_{s_{k-1}}^{s_k}\tau(s)\,\mathrm{d}s = \int_{\tau_{k-1}}^{\tau_k}\tau\,\mathrm{d}\tau = \left[\frac{\tau^2}{2}\right]_{\tau_{k-1}}^{\tau_k} = \frac{\tau_k^2 - \tau_{k-1}^2}{2} = (\tau_k - \tau_{k-1})\,\frac{\tau_k + \tau_{k-1}}{2} = (\tau_k - \tau_{k-1})\,\overline{\tau}^{(k)}\,, \tag{B.60}$$

où $\overline{\tau}^{(k)}$ désigne le volume moyen arithmétique des gouttes de la section k, que l'on peut faire apparaitre également via les moments. En effet :

$$\frac{\rho^{(k)}}{\rho_0^{(k)}n^{(k)}} = \frac{\alpha^{(k)}}{n^{(k)}} = \overline{\tau}^{(k)}\,. \tag{B.61}$$

Il vient donc :

$$c^{(k)} = \frac{\overline{\tau}^{(k)}}{\overline{\tau}^{(k)}\,(\tau_k - \tau_{k-1})} = \frac{1}{(\tau_k - \tau_{k-1})}\,. \tag{B.62}$$

Soit finalement, puisque le volume constitue la variable taille :

$$c^{(k)} = \frac{1}{(s_k - s_{k-1})}\,. \tag{B.63}$$

Le choix d'une autre variable pour la taille (diamètre ou surface par exemple), conduit à un résultat équivalent en la variable considérée, sous réserve d'une définition adaptée de la taille moyenne. Par ailleurs, on remarque que le coefficient $c^{(k)}$ et donc la fonction de distribution $\phi_s^{(k)}$ sont constantes dans le temps et dans l'espace, ne dépendant que des bornes des sections. Seuls les moments $n^{(k)}$ et $\rho^{(k)}$ peuvent varier.

Sectionnel d'ordre 2

Les reconstructions d'ordre 2 sont celles qui utilisent des fonctions de distribution à deux paramètres, $a^{(k)}(t,\boldsymbol{x})$ et $b^{(k)}(t,\boldsymbol{x})$. Nous avons donné les exemples de la reconstruction affine et exponentielle, respectivement en (B.52)

et (B.53). Dans les deux cas, la détermination des coefficients $a^{(k)}$ et $b^{(k)}$ passe par la résolution du système à deux équations (l'équation de normalisation et la définition de $\rho^{(k)}$) et deux inconnues ($a^{(k)}$ et $b^{(k)}$) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \displaystyle\int_{s_{k-1}}^{s_k} \phi_s^{(k)}\left(a^{(k)}(t,\boldsymbol{x}), b^{(k)}(t,\boldsymbol{x}), s\right) \mathrm{d}s = 1 \\ \\ \rho^{(k)}(t,\boldsymbol{x}) = n^{(k)}(t,\boldsymbol{x})\,\rho_0 \displaystyle\int_{I_s^{(k)}} \tau(s)\,\phi_s^{(k)}\left(a^{(k)}(t,\boldsymbol{x}), b^{(k)}(t,\boldsymbol{x}), s\right) \mathrm{d}s \end{array} \right. \quad \Longrightarrow \quad \left\{ \begin{array}{l} a^{(k)}(t,\boldsymbol{x}) = \ldots \\ \\ b^{(k)}(t,\boldsymbol{x}) = \ldots \end{array} \right. \tag{B.64}$$

Le choix de la forme de la distribution $\phi_s^{(k)}$ (affine, exponentielle, ou autre), ainsi que celui de la variable taille (diamètre, surface ou volume), conditionnent la résolution du système notamment quant à une éventuelle solution analytique. Dans certains cas, la résolution analytique n'est pas possible et il faut avoir recours à des calculs d'intégrales numériques, ce qui peut apporter un surcoût non négligeable. C'est typiquement le cas de la reconstruction exponentielle, et c'est ce qui a justifié le développement des méthodes à reconstruction affine (SIBRA [251], SIBRA et al. [252]). Malheureusement, même les méthodes permettant une inversion analytique des coefficients $a^{(k)}$ et $b^{(k)}$ peuvent nécessiter ensuite des calculs d'intégrales numériques au moment du calcul des termes sources.

Problématique de la réalisabilité

Un point délicat concernant les méthodes sectionnelles réside dans le respect des ***conditions de réalisabilité*** suivantes lors du passage entre les moments et les coefficients des fonctions de distribution (SIBRA [251]) :

(i) la fonction de distribution doit être à valeurs positives ou nulles, c'est-à-dire :

$$\forall k,\ \forall t,\ \forall \boldsymbol{x},\ \forall s,\ \ \phi_s^{(k)}(t,\boldsymbol{x},s) \geq 0\,. \tag{B.65}$$

(ii) l'espace des moments doit être préservé, ce qui signifie que la taille moyenne $\overline{s}^{(k)}$ définie par les moments $n^{(k)}$ et $\rho^{(k)}$ doit être strictement comprise entre les bornes s_{k-1} et s_k de la section concernée. En raisonnant par exemple en variable diamètre, un diamètre moyen $\overline{D}^{(k)}$ s'obtient en fonction des moments $n^{(k)}$ et $\rho^{(k)}$ via la relation suivante :

$$\overline{D}^{(k)} = \left(\frac{6}{\pi}\frac{\alpha^{(k)}}{n^{(k)}}\right)^{1/3} = \left(\frac{6}{\pi}\frac{\rho^{(k)}}{\rho_0^{(k)} n^{(k)}}\right)^{1/3}\,. \tag{B.66}$$

Ce diamètre moyen doit alors être compris entre les bornes de la section k pour satisfaire les conditions de réalisabilité :

$$D_{k-1} < \overline{D}^{(k)} < D_k\,. \tag{B.67}$$

B.4.4 Démarche-type d'un calcul sectionnel

Afin de bien fixer les idées, les différentes étapes d'une simulation utilisant une méthode sectionnelle sont résumées ci-dessous.

(i) L'utilisateur commence par choisir le nombre de sections N_s (généralement limité par des considérations de coût de calcul), puis leurs bornes (en fonction des caractéristiques pré-supposées de la phase dispersée à traiter). Il choisit également un modèle sectionnel parmi d'autres, ce qui signifie choisir la forme des distributions par section : constante, affine, ou exponentielle, par exemple.

(ii) Ce même utilisateur définit les conditions initiales et aux limites du calcul, en particulier la valeur des moments $n^{(k)}$ et $\rho^{(k)}$ pour chaque section. Il est généralement plus naturel de spécifier ces conditions par l'intermédiaire des variables primitives des équations (fraction volumique $\alpha^{(k)}$ et diamètre moyen $D^{(k)}$), puis d'en déduire $n^{(k)}$ via la relation (B.66) (ce qui suppose que $D^{(k)}$ est un diamètre moyen de type D_{30}) et $\rho^{(k)}$ via la relation $\rho^{(k)} = \alpha^{(k)}\,\rho_0^{(k)}$. Évidemment, le diamètre moyen $D^{(k)}$ spécifié en entrée de calcul par l'utilisateur doit être compris entre les bornes de la section k, sans quoi les conditions de réalisabilité évoquées précédemment ne sont pas respectées dès le départ.

(iii) Les moments $n^{(k)}$ et $\rho^{(k)}$ font l'objet d'équations de conservation qui sont résolues numériquement. Dans le cadre des méthodes de splitting d'opérateurs par exemple, on procède d'abord à un avancement en temps de la partie convective des équations, ce qui donne lieu à une première actualisation des moments $n^{(k)}$ et $\rho^{(k)}$.

(iv) Puis un second avancement en temps est réalisé pour les termes sources. Tout l'intérêt des méthodes sectionnelles réside alors dans cette étape : les termes sources peuvent être intégrés sur la variable taille au lieu d'être simplement évalués pour une unique taille moyenne. Pour cela, il est nécessaire de réactualiser les coefficients des fonctions de distribution de chaque section ($a^{(k)}$ et $b^{(k)}$ ou bien $c^{(k)}$) en cohérence avec

l'évolution des moments $n^{(k)}$ et $\rho^{(k)}$. Finalement, l'intégration temporelle des termes sources conduit à une réactualisation de la valeur des moments $n^{(k)}$ et $\rho^{(k)}$. Ceux-ci sont ensuite de nouveau avancés en temps, et ainsi de suite. L'ensemble de ce processus peut être résumé de la manière suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} n^{(k)} \\ \\ \rho^{(k)} \end{array} \right. \Longrightarrow \left\{ \begin{array}{l} a^{(k)} \\ \\ b^{(k)} \end{array} \right. \Longrightarrow \quad \phi_s^{(k)} \Longrightarrow \quad \dot{m}_v^{(k)},\ \boldsymbol{F_{dr}}^{(k)},\ \Phi_c^{(k)},\ \widehat{\Gamma}^{(k)},\ \widehat{Q}^{(k)} \ldots \Longrightarrow \left\{ \begin{array}{l} n^{(k)} \\ \\ \rho^{(k)} \end{array} \right. \tag{B.68}$$

B.4.5 Intégration numérique des termes sources

Cette annexe a permis de montrer comment sont obtenues les équations (B.56) des méthodes sectionnelles. Toutefois, les stratégies de résolution numérique de ces équations n'ont pas été abordées ici. La partie convective des équations est en tout point similaire à celle des autres modèles, aussi sa résolution numérique peut être abordée indépendamment des aspects de discrétisation en taille. Évidemment, il en va différemment de l'intégration des termes sources. Selon la forme choisie des distributions, des schémas d'intégration spécifiques doivent être développés. Notamment pour décrire les termes de coalescence et de fragmentation ou les flux entre sections liés à l'évaporation. Il s'agit bien de schémas numériques d'intégration, et non pas des modèles physiques sous-jacents, dont on donne les expressions classiques à l'échelle d'une goutte au Chapitre 7.

A titre d'exemple, dans le cas des termes de flux entre sections liés à l'évaporation, les schémas numériques développés par SIBRA et al. [252] sont analogues aux schémas de flux classiques des méthodes volumes finis. Mais ils décrivent des flux dans l'espace des tailles et non dans l'espace physique. On retrouve ainsi des notions telles que la stabilité des schémas conditionnée par le respect d'un critère CFL "évaporant" (cf. § 7.2.2). Le lecteur intéressé par les schémas d'intégration des termes sources en sectionnel est invité à consulter les références DUFOUR [77], DUFOUR et VILLEDIEU [78] et DOISNEAU [71] pour ce qui concerne les termes de fragmentation et de coalescence, ainsi que les références SIBRA [251] et SIBRA et al. [252] pour l'évaporation.

B.5 Incidence du choix de la variable taille

Toutes les démonstrations présentées dans cette annexe ont été réalisées en conservant une variable taille s indéfinie. Néanmoins, cette indécision doit finir par être tranchée, notamment dans le cas des méthodes sectionnelles où il faut choisir en quelle variable s'expriment les fonctions de distribution $\phi_s^{(k)}$. En d'autres termes, il faut choisir si s désigne le diamètre (ou le rayon), la surface ou le volume.

Au premier abord, il semble naturel de travailler en variable "diamètre", dans la mesure où l'on rencontre le plus souvent les distributions en taille de gouttes (expérimentales notamment) exprimées en diamètre. Cependant, les modèles qui expriment les termes sources à l'échelle d'une goutte sont généralement proportionnels à la surface. C'est le cas en particulier de l'évaporation et de la force de traînée. C'est pourquoi certains auteurs préfèrent travailler en variable "surface" (SIBRA [251]). L'expression des intégrales de certains termes sources s'en trouve simplifiée, et rend ainsi possible un calcul analytique là ou un calcul numérique approché serait inévitable si la fonction de distribution était exprimée en une variable différente. Malheureusement, il n'existe pas de choix ultime qui permette d'éviter le recours à des intégrales numériques pour tous les termes possibles.

Il faut donc bien comprendre que le choix de la variable taille n'a pas d'incidence sur le modèle en lui-même mais seulement sur la résolution pratique des équations. Pour illustrer cela simplement, prenons l'exemple du terme d'évaporation $\dot{m}_v$ dans le modèle bi-fluide, dépendant d'une variable taille s indéfinie. Ce terme est exprimé par la relation suivante (il s'agit de la relation (B.47) en omettant la notation des moyennes) :

$$\dot{m}_v = -\rho_0\, \tau'(s)\, \mathcal{K}(s)\ . \tag{B.69}$$

Or, on rappelle que le terme $\mathcal{K}$ désigne directement la variation temporelle de la taille d'une goutte :

$$\mathcal{K} = \frac{\mathrm{d}\, s}{\mathrm{d}\, t}\ . \tag{B.70}$$

Ainsi, si l'on choisit de travailler avec le rayon des gouttes R en tant que variable taille ($s \equiv R$), nous aurons

$$\tau(R) = \frac{4}{3}\pi R^3 \quad \Rightarrow \quad \tau'(R) = 4\pi R^2 = \mathcal{S} \quad \Rightarrow \quad \dot{m}_v = \rho_0\, \mathcal{S} \frac{\mathrm{d}\, R}{\mathrm{d}\, t}\ , \tag{B.71}$$

où $\mathcal{S}$ désigne la surface de la goutte. Si l'on choisit de travailler avec le diamètre $D = 2R$ en tant que variable taille ($s \equiv D$), nous retrouvons la même chose :

$$\tau(D) = \frac{\pi D^3}{6} \quad \Rightarrow \quad \tau'(D) = \frac{\pi}{2} D^2 = \frac{\mathcal{S}}{2} \quad \Rightarrow \quad \dot{m}_v = \rho_0 \frac{\mathcal{S}}{2} \frac{\mathrm{d}\, D}{\mathrm{d}\, t} = \rho_0\, \mathcal{S} \frac{\mathrm{d}\, R}{\mathrm{d}\, t}\ . \tag{B.72}$$

De même, il est possible de travailler directement avec la variable surface ($s \equiv \mathcal{S}$), ce qui conduit toujours au même résultat :

$$\tau(\mathcal{S}) = \frac{\mathcal{S}^{3/2}}{6\sqrt{\pi}} \quad \Rightarrow \quad \tau'(\mathcal{S}) = \frac{\mathcal{S}^{1/2}}{4\sqrt{\pi}} \quad \Rightarrow \quad \dot{m}_v = \rho_0 \frac{\mathcal{S}^{1/2}}{4\sqrt{\pi}} \frac{\mathrm{d}\,\mathcal{S}}{\mathrm{d}\,t} = ... = \rho_0 \mathcal{S} \frac{\mathrm{d}\,R}{\mathrm{d}\,t} \,. \tag{B.73}$$

Enfin, travailler directement avec la variable volume ($s \equiv \tau$) donne encore une fois le même résultat :

$$\tau(\tau) = \tau \quad \Rightarrow \quad \tau'(\tau) = 1 \quad \Rightarrow \quad \dot{m}_v = \rho_0 \frac{\mathrm{d}\,\tau}{\mathrm{d}\,t} = \rho_0 \frac{4\pi}{3} \frac{\mathrm{d}\,R^3}{\mathrm{d}\,t} = \rho_0 \mathcal{S} \frac{\mathrm{d}\,R}{\mathrm{d}\,t} \,. \tag{B.74}$$

B.6 Dérivation d'une équation sur l'énergie totale

Nous avons établi aux paragraphes précédents les systèmes d'équations correspondant aux différents modèles de la littérature. Ils incluent tous une équation sur l'énergie interne. Or il est parfois souhaitable de résoudre une équation sur l'énergie totale et non pas sur l'énergie interne. Cela peut notamment faciliter le couplage avec une phase gazeuse décrite par une équation sur son énergie totale [5]. Une équation sur l'énergie totale des particules peut être obtenue facilement en combinant l'équation sur l'énergie interne et une équation sur l'énergie cinétique, dérivée de celle sur la quantité de mouvement. En effet, l'énergie totale $\widetilde{e_T}$ est définie comme la somme de l'énergie interne et de l'énergie cinétique :

$$\widetilde{e_T} = \widetilde{e} + \frac{1}{2}\widetilde{v}^2 \tag{B.75}$$

Nous détaillons ici la procédure pour établir l'équation sur l'énergie totale dans le cadre du modèle bi-fluide. Néanmoins cette procédure se généralise facilement aux autres modèles. Dans tous les cas, il faut passer par les étapes suivantes :

(i) écrire l'équation de quantité de mouvement du système (B.48) sous forme non-conservative en utilisant l'équation sur la masse.

(ii) faire le produit scalaire de l'équation de quantité de mouvement sous forme non-conservative par le vecteur vitesse. Il en résulte après quelques étapes calculatoires une équation pour l'énergie cinétique.

(iii) combiner cette équation sur l'énergie cinétique avec l'équation sur l'énergie interne pour obtenir l'équation sur l'énergie totale.

Ces étapes sont détaillées dans les paragraphes qui suivent, où nous réintroduisons $\rho = \alpha\rho_0$.

B.6.1 Écriture de l'équation de quantité de mouvement sous forme non-conservative

Rappelons d'abord l'équation sur la quantité de mouvement écrite sous forme conservative :

$$\frac{\partial \rho \widetilde{\boldsymbol{v}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \widetilde{\boldsymbol{v}} \otimes \widetilde{\boldsymbol{v}}) = -n\,\dot{m}_v \widetilde{\boldsymbol{v}} + n\boldsymbol{F_{dr}} \,. \tag{B.76}$$

Il s'agit d'une équation vectorielle. Pour plus de clarté, écrivons-la pour une composante quelconque de la vitesse et de la force de traînée (en coordonnées cartésiennes), notées respectivement $\widetilde{v_i}$ et $F_{dr,i}$:

$$\frac{\partial \rho \widetilde{v_i}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \widetilde{v_i} \widetilde{\boldsymbol{v}}) = -n\,\dot{m}_v \widetilde{v_i} + nF_{dr,i} \,, \qquad 1 \leq i \leq 3 \,. \tag{B.77}$$

Une formule d'analyse vectorielle utile permet de décomposer la divergence du produit d'un scalaire par un vecteur, en faisant intervenir le gradient du scalaire. Si a est un scalaire et $\boldsymbol{U}$ un vecteur, nous avons

$$\nabla \cdot (a\boldsymbol{U}) = a\nabla \cdot \boldsymbol{U} + \boldsymbol{U} \cdot \nabla a \,. \tag{B.78}$$

Il vient pour l'équation de la quantité de mouvement :

$$\rho \frac{\partial \widetilde{v_i}}{\partial t} + \widetilde{v_i} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \widetilde{v_i} \nabla \cdot (\rho \widetilde{\boldsymbol{v}}) + \rho \widetilde{\boldsymbol{v}} \cdot \nabla \widetilde{v_i} = -n\,\dot{m}_v \widetilde{v_i} + nF_{dr,i} \,, \qquad 1 \leq i \leq 3 \,, \tag{B.79}$$

puis

$$\rho \left(\frac{\partial \widetilde{v_i}}{\partial t} + \widetilde{\boldsymbol{v}} \cdot \nabla \widetilde{v_i} \right) + \underbrace{\widetilde{v_i} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \widetilde{\boldsymbol{v}}) + n\,\dot{m}_v \right)}_{=\,0} = nF_{dr,i} \,, \qquad 1 \leq i \leq 3 \,. \tag{B.80}$$

5. Cependant, il est important de préciser que le système incluant une équation sur l'énergie interne n'est pas tout à fait équivalent à celui incluant une équation sur l'énergie totale. Dans le second cas, un couplage est introduit entre l'équation de conservation de la quantité de mouvement et celle portant sur l'énergie totale, puisque celle-ci contient l'énergie cinétique et dépend donc de la vitesse. Dans certaines configurations particulières (δ-chocs), les solutions numériques de ces deux systèmes ne sont plus strictement équivalentes.

Le deuxième terme s'annule effectivement en utilisant l'équation de conservation de la masse du système (B.48). Il vient donc :

$$\rho\left(\frac{\partial \widetilde{v_i}}{\partial t} + \widetilde{\boldsymbol{v}} \cdot \nabla \widetilde{v_i}\right) = nF_{dr,i}\,, \qquad 1 \leq i \leq 3\,. \tag{B.81}$$

En restituant la notation vectorielle, nous obtenons finalement l'équation de quantité de mouvement sous forme non conservative :

$$\boxed{\rho\left(\frac{\partial \widetilde{\boldsymbol{v}}}{\partial t} + (\widetilde{\boldsymbol{v}} \cdot \nabla)\widetilde{\boldsymbol{v}}\right) = n\boldsymbol{F_{dr}}\,.} \tag{B.82}$$

B.6.2 Établissement de l'équation sur l'énergie cinétique

Nous allons maintenant établir une équation sur l'énergie cinétique en effectuant le produit scalaire de l'équation de quantité de mouvement sous forme non conservative par le vecteur vitesse, c'est-à-dire en procédant à l'opération suivante :

$$\text{Eq. (B.82)} \cdot \widetilde{\boldsymbol{v}}\,. \tag{B.83}$$

Commençons par introduire une seconde formule d'analyse vectorielle utile :

$$(\widetilde{\boldsymbol{v}} \cdot \nabla)\widetilde{\boldsymbol{v}} = \widetilde{\boldsymbol{v}} \cdot (\nabla \widetilde{\boldsymbol{v}}) = \nabla\left(\frac{\widetilde{v}^2}{2}\right) + (\nabla \wedge \widetilde{\boldsymbol{v}}) \wedge \widetilde{\boldsymbol{v}}\,, \tag{B.84}$$

où $\nabla\widetilde{\boldsymbol{v}}$ est le tenseur gradient de vitesse, $\wedge$ désigne le produit vectoriel et $\nabla\wedge$ désigne l'opérateur rotationnel. Il vient alors :

$$\rho\left(\frac{\partial \widetilde{\boldsymbol{v}}}{\partial t} \cdot \widetilde{\boldsymbol{v}} + \nabla\left(\frac{\widetilde{v}^2}{2}\right) \cdot \widetilde{\boldsymbol{v}} + \underbrace{\left[(\nabla \wedge \widetilde{\boldsymbol{v}}) \wedge \widetilde{\boldsymbol{v}}\right] \cdot \widetilde{\boldsymbol{v}}}_{=\,0}\right) = n\boldsymbol{F_{dr}} \cdot \widetilde{\boldsymbol{v}}\,. \tag{B.85}$$

Par propriété du produit mixte, le troisième terme s'annule. Il vient ensuite :

$$\rho\frac{\partial \widetilde{\boldsymbol{v}}}{\partial t} \cdot \widetilde{\boldsymbol{v}} + \rho\nabla\left(\frac{\widetilde{v}^2}{2}\right) \cdot \widetilde{\boldsymbol{v}} = n\boldsymbol{F_{dr}} \cdot \widetilde{\boldsymbol{v}}\,. \tag{B.86}$$

Or, nous avons d'une part :

$$\rho\frac{\partial \widetilde{\boldsymbol{v}}}{\partial t} \cdot \widetilde{\boldsymbol{v}} = \frac{1}{2}\rho\frac{\partial \widetilde{v}^2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}\left(\rho\frac{\widetilde{v}^2}{2}\right) - \frac{\widetilde{v}^2}{2}\frac{\partial \rho}{\partial t}\,. \tag{B.87}$$

Et d'autre part, en utilisant la propriété (B.78), nous avons

$$\rho\nabla\left(\frac{\widetilde{v}^2}{2}\right) \cdot \widetilde{\boldsymbol{v}} = \nabla \cdot \left(\rho\frac{\widetilde{v}^2}{2}\widetilde{\boldsymbol{v}}\right) - \frac{\widetilde{v}^2}{2}\nabla \cdot (\rho\widetilde{\boldsymbol{v}})\,. \tag{B.88}$$

La relation (B.86) devient

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho\frac{\widetilde{v}^2}{2}\right) - \frac{\widetilde{v}^2}{2}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho\frac{\widetilde{v}^2}{2}\widetilde{\boldsymbol{v}}\right) - \frac{\widetilde{v}^2}{2}\nabla \cdot (\rho\widetilde{\boldsymbol{v}}) = n\boldsymbol{F_{dr}} \cdot \widetilde{\boldsymbol{v}}\,, \tag{B.89}$$

puis

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho\frac{\widetilde{v}^2}{2}\right) + \nabla \cdot \left(\rho\frac{\widetilde{v}^2}{2}\widetilde{\boldsymbol{v}}\right) - \frac{\widetilde{v}^2}{2}\underbrace{\left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\widetilde{\boldsymbol{v}})\right)}_{=\,-n\,\dot{m}_v} = n\boldsymbol{F_{dr}} \cdot \widetilde{\boldsymbol{v}}\,. \tag{B.90}$$

Le troisième terme fait une nouvelle fois apparaitre l'équation sur la masse. Finalement, nous obtenons l'équation suivante sur l'énergie cinétique :

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho\frac{\widetilde{v}^2}{2}\right) + \nabla \cdot \left(\rho\frac{\widetilde{v}^2}{2}\widetilde{\boldsymbol{v}}\right) = -\frac{\widetilde{v}^2}{2}\,n\,\dot{m}_v + n\boldsymbol{F_{dr}} \cdot \widetilde{\boldsymbol{v}}\,.} \tag{B.91}$$

B.6.3 Établissement de l'équation sur l'énergie totale

L'énergie totale est la somme de l'énergie interne et de l'énergie cinétique (cf. (B.75)). Son équation s'obtient donc simplement en sommant l'équation pour l'énergie interne du système (B.48) et l'équation (B.91) pour l'énergie cinétique. Il vient donc

$$\frac{\partial \rho \widetilde{e}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t}\left(\rho \frac{\widetilde{v}^2}{2}\right) + \nabla \cdot (\rho \widetilde{e} \widetilde{\boldsymbol{v}}) + \nabla \cdot \left(\rho \frac{\widetilde{v}^2}{2} \widetilde{\boldsymbol{v}}\right) = -\widetilde{e}\, n\, \dot{m}_v - \frac{\widetilde{v}^2}{2}\, n\, \dot{m}_v + n\, \Phi_c + n \boldsymbol{F_{dr}} \cdot \widetilde{\boldsymbol{v}}\,, \tag{B.92}$$

puis

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\rho\left(\widetilde{e} + \frac{\widetilde{v}^2}{2}\right)\right] + \nabla \cdot \left[\rho\left(\widetilde{e} + \frac{\widetilde{v}^2}{2}\right)\widetilde{\boldsymbol{v}}\right] = -n\, \dot{m}_v \left(\widetilde{e} + \frac{\widetilde{v}^2}{2}\right) + n\, \Phi_c + n \boldsymbol{F_{dr}} \cdot \widetilde{\boldsymbol{v}}\,. \tag{B.93}$$

Finalement, en introduisant l'énergie totale $\widetilde{e_T} = \widetilde{e} + \widetilde{v}^2/2$, nous obtenons

$$\boxed{\frac{\partial \rho \widetilde{e_T}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \widetilde{e_T} \widetilde{\boldsymbol{v}}) = -n\, \dot{m}_v \widetilde{e_T} + n\, \Phi_c + n \boldsymbol{F_{dr}} \cdot \widetilde{\boldsymbol{v}}\,.} \tag{B.94}$$

Annexe C

Définitions et propriétés sur les tenseurs

Tenseur des taux de déformation total

Le tenseur des taux de déformation total $\boldsymbol{L}$ n'est autre que le tenseur gradient de vitesse, $\boldsymbol{L}^T$ désigne alors son tenseur transposé. Ils s'expriment en coordonnées cartésiennes de la manière suivante :

$$\boldsymbol{L} = \nabla \otimes \boldsymbol{u} = \begin{pmatrix} \partial_x u_x & \partial_y u_x & \partial_z u_x \\ \partial_x u_y & \partial_y u_y & \partial_z u_y \\ \partial_x u_z & \partial_y u_z & \partial_z u_z \end{pmatrix}, \qquad \text{et} \quad \boldsymbol{L}^T = (\nabla \otimes \boldsymbol{u})^T = \begin{pmatrix} \partial_x u_x & \partial_x u_y & \partial_x u_z \\ \partial_y u_x & \partial_y u_y & \partial_y u_z \\ \partial_z u_x & \partial_z u_y & \partial_z u_z \end{pmatrix}. \tag{C.1}$$

Décomposition en partie symétrique et antisymétrique

Le tenseur $\boldsymbol{L}$ peut être décomposé en une partie symétrique et une partie antisymétrique :

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{S} + \boldsymbol{\Omega}\,, \qquad \text{et} \quad \boldsymbol{L}^T = \boldsymbol{S} - \boldsymbol{\Omega}\,, \tag{C.2}$$

où le tenseur symétrique $\boldsymbol{S}$ s'écrit

$$\boldsymbol{S} = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{L} + \boldsymbol{L}^T\right) = \frac{1}{2}\left[\nabla \otimes \boldsymbol{u} + (\nabla \otimes \boldsymbol{u})^T\right] = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 2\partial_x u_x & \partial_y u_x + \partial_x u_y & \partial_z u_x + \partial_x u_z \\ \partial_x u_y + \partial_y u_x & 2\partial_y u_y & \partial_z u_y + \partial_y u_z \\ \partial_x u_z + \partial_z u_x & \partial_y u_z + \partial_z u_y & 2\partial_z u_z \end{pmatrix}. \tag{C.3}$$

Ses composantes vérifient donc la propriété $S_{ij} = S_{ji}$. Le tenseur antisymétrique s'écrit :

$$\boldsymbol{\Omega} = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{L} - \boldsymbol{L}^T\right) = \frac{1}{2}\left[\nabla \otimes \boldsymbol{u} - (\nabla \otimes \boldsymbol{u})^T\right] = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & \partial_y u_x - \partial_x u_y & \partial_z u_x - \partial_x u_z \\ \partial_x u_y - \partial_y u_x & 0 & \partial_z u_y - \partial_y u_z \\ \partial_x u_z - \partial_z u_x & \partial_y u_z - \partial_z u_y & 0 \end{pmatrix}, \tag{C.4}$$

et ses composantes vérifient la propriété $\Omega_{ij} = -\Omega_{ji}$. Le tenseur symétrique traduit les élongations ou contractions (termes diagonaux) ainsi que des déformations angulaires pures (termes non diagonaux). Il s'agit donc du ***tenseur des taux de déformation pure***. Le tenseur antisymétrique traduit les rotations et est donc appelé ***tenseur des taux de rotations pures***.

Décomposition en partie sphérique et déviateur

Le tenseur des déformations total $\boldsymbol{L}$ peut également être décomposé en une partie sphérique $\boldsymbol{L}'$ (ou isotrope) et une partie déviateur $\boldsymbol{L}''$:

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{L}' + \boldsymbol{L}''\,. \tag{C.5}$$

La partie isotrope est définie par :

$$\boldsymbol{L}' = \frac{1}{3} tr(\boldsymbol{L})\boldsymbol{I}\,, \tag{C.6}$$

et la partie déviateur s'écrit donc :

$$\boldsymbol{L}'' = \boldsymbol{L} - \boldsymbol{L}' = \boldsymbol{L} - \frac{1}{3} tr(\boldsymbol{L})\boldsymbol{I}\,. \tag{C.7}$$

On utilise également le déviateur du tenseur des déformations ***symétrique***, noté $\boldsymbol{D}$. Par définition du déviateur, il s'écrit

$$\boldsymbol{D} = \boldsymbol{S}'' = \boldsymbol{S} - \boldsymbol{S}' = \boldsymbol{S} - \frac{1}{3} tr(\boldsymbol{S})\boldsymbol{I} = \boldsymbol{S} - \frac{1}{3}(\nabla \cdot \boldsymbol{u})\boldsymbol{I}\,. \tag{C.8}$$

Il s'agit également d'un tenseur symétrique.

Invariants

Introduisons les invariants suivants :

$$II_S = \sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3} S_{ij}S_{ij} = S_{11}^2 + S_{12}^2 + S_{13}^2 + S_{21}^2 + S_{22}^2 + S_{23}^2 + S_{31}^2 + S_{32}^2 + S_{33}^2 \,, \tag{C.9}$$

$$II_\Omega = \sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3} -\Omega_{ij}\Omega_{ij} = -\Omega_{11}^2 - \Omega_{12}^2 - \Omega_{13}^2 - \Omega_{21}^2 - \Omega_{22}^2 - \Omega_{23}^2 - \Omega_{31}^2 - \Omega_{32}^2 - \Omega_{33}^2 \,, \tag{C.10}$$

$$II_D = \sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3} D_{ij}D_{ij} = D_{11}^2 + D_{12}^2 + D_{13}^2 + D_{21}^2 + D_{22}^2 + D_{23}^2 + D_{31}^2 + D_{32}^2 + D_{33}^2 \,. \tag{C.11}$$

Du fait de la symétrie des tenseurs $\boldsymbol{S}$ et $\boldsymbol{D}$, et du fait de l'antisymétrie du tenseur $\boldsymbol{\Omega}$, les invariants précédents peuvent s'exprimer sous la forme de produits doublement contractés :

$$II_S = S_{11}^2 + S_{22}^2 + S_{33}^2 + 2S_{12}^2 + 2S_{13}^2 + 2S_{23}^2 = \boldsymbol{S} : \boldsymbol{S} \,, \tag{C.12}$$

$$II_D = D_{11}^2 + D_{22}^2 + D_{33}^2 + 2D_{12}^2 + 2D_{13}^2 + 2D_{23}^2 = \boldsymbol{D} : \boldsymbol{D} \,, \tag{C.13}$$

$$II_\Omega = -\Omega_{11}^2 - \Omega_{22}^2 - \Omega_{33}^2 + 2\Omega_{12}^2 + 2\Omega_{13}^2 + 2\Omega_{23}^2 = -\boldsymbol{\Omega} : \boldsymbol{\Omega} \,. \tag{C.14}$$

On rappelle la définition du produit tensoriel doublement contracté pour des tenseurs d'ordre 2 en dimension 3 :

$$\boldsymbol{A} : \boldsymbol{B} = \sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3} A_{ij}B_{ji} = A_{11}B_{11} + A_{22}B_{22} + A_{33}B_{33} + 2A_{12}B_{21} + 2A_{13}B_{31} + 2A_{23}B_{32} \,. \tag{C.15}$$

Annexe D

Étude de la fermeture thermodynamique du système fluide

La description des écoulements diphasiques à interfaces dans CEDRE s'appuie sur les équations de Navier-Stokes multi-espèces, associées à des schémas numériques décentrés. Il est connu que cette approche est susceptible de générer des oscillations de pression purement numériques à l'interface entre des milieux matériels différents, lorsque la température n'est pas uniforme (Abgrall et Karni [3]). Dans cette annexe, une analyse rapide de l'origine de ce phénomène, ainsi qu'une revue succincte des différentes approches développées dans la littérature pour y remédier, sont d'abord présentées. On s'attache ensuite à analyser et quantifier ce phénomène dans le cadre précis de la procédure de fermeture thermodynamique utilisée dans CEDRE et décrite en § 5.5. Il s'agit alors d'évaluer la survenue éventuelle et l'amplitude de ces oscillations de pression pour les conditions typiques des simulations diphasiques que nous visons avec CEDRE. L'objectif final de l'annexe réside dans la mise en place d'une stratégie simple permettant de les limiter au mieux, en fonction des libertés dont nous disposons en termes de modification du code. Sauf mention contraire, toutes les grandeurs physiques utilisées dans cette annexe sont exprimées en unités S.I.

D.1 Revue bibliographique élémentaire

Ce paragraphe présente un bref aperçu des travaux de la littérature qui analysent et proposent des solutions à la problématique des oscillations de pression générées par les solveurs compressibles multi-espèces à fluide homogène. Des revues plus détaillées sont disponibles dans les références Saurel et Lemetayer [239], Abgrall et Karni [3] et Johnsen et Ham [152].

D.1.1 Analyse et origine du phénomène

Ce phénomène a été mis en évidence et analysé initialement par Abgrall [1, 2] et Karni [156]. Une analyse similaire a également été faite par Jenny et al. [150]. Ces auteurs considèrent le cas d'un mélange de deux espèces gazeuses traitées par les équations d'Euler compressibles monodimensionnelles. La résolution numérique des équations utilise des méthodes de décentrement classiques, couramment utilisées pour traiter les écoulements de la dynamique des gaz compressibles. Dans un premier temps, l'analyse est effectuée à l'ordre 1 en temps et en espace. Nous ne reproduisons pas ici le développement analytique en question dans la mesure où le paragraphe § D.2 reproduit une analyse similaire sur le même cas, spécifiquement appliquée au formalisme de la bibliothèque de thermodynamique de CEDRE. Les conditions initiales considérées sont celles d'une discontinuité de contact supersonique. La pression et la vitesse sont ainsi uniformes à travers l'interface, tandis que la température et la composition (et donc éventuellement la densité) peuvent varier. La solution exacte de ce problème est connue, et notamment les grandeurs qui sont initialement uniformes à travers l'interface doivent le rester. L'objectif de l'analyse est d'alors de déterminer sous quelles conditions et dans quelles proportions l'algorithme de résolution numérique parvient ou ne parvient pas à respecter les conditions d'interface, c'est-à-dire ***à conserver l'uniformité de la pression et de la vitesse***.

Pour le cas d'étude défini, il est assez simple d'écrire de manière exacte l'avancement en temps du système. Le pas de temps est choisi de manière à respecter un critère de stabilité CFL. Ainsi l'interface se déplace d'une

longueur inférieure à l'épaisseur d'un volume de contrôle à la fin du premier cycle en temps, et les deux espèces initialement séparées se retrouvent mélangées. Dès lors, si la loi d'état thermodynamique qui ferme le système est celle des gaz parfaits, on détermine ce qu'il advient de la température et de la pression après ce premier cycle, en fonction des quantités qui ont été avancées par le système, en l'occurrence l'énergie totale et les densités partielles. Les auteurs établissent que la vitesse reste uniforme après le premier cycle. En revanche, l'uniformité de la pression disparait lorsque les deux espèces présentent initialement des températures et des coefficients isentropiques γ différents. Cette variation de pression se répercute ensuite sur la vitesse au cycle suivant, et des oscillations persistent ensuite au cours de la simulation. L'explication proposée réside dans le fait que le calcul de la pression en fin de cycle fait intervenir deux quantités qui ont été avancées en temps de manière indépendante, et en réalité inconsistante. En effet, la pression en fin de cycle (instant t^{n+1}) s'obtient par l'expression

$$P^{n+1} = \left(\gamma^{n+1} - 1\right) e^{n+1} . \tag{D.1}$$

Dans cette relation, l'énergie interne est recalculée à partir de l'avancement de l'énergie totale. Parallèlement, le rapport γ des chaleurs massiques est recalculé à partir de l'avancement des densités partielles, et par suite à partir des fractions massiques :

$$\gamma^{n+1} = \frac{Y_1^{n+1}\gamma_1 c_{v,1} + Y_2^{n+1}\gamma_2 c_{v,2}}{Y_1^{n+1} c_{v,1} + Y_2^{n+1} c_{v,2}} . \tag{D.2}$$

La valeur γ^{n+1} ne correspondrait alors pas à la "bonne" valeur de γ, celle qui permettrait de préserver l'uniformité de la pression. De nombreuses solutions ont été proposées et testées dans la littérature pour s'attaquer à ce problème. Elles peuvent être divisées en deux catégories, selon la classification opérée dans SAUREL et LEMETAYER [239].

D.1.2 Solutions interdisant la diffusion de l'interface

Une manière d'éliminer tout problème inhérent à la diffusion numérique de l'interface, est justement de parvenir à éliminer cette diffusion numérique. Ce type d'approche s'applique particulièrement aux cas présentant des interfaces matérielles (écoulements diphasiques). Il existe ainsi des méthodes qui s'attachent à reconstruire la forme de l'interface au sein des volumes de contrôle. Dans l'approche VOF (Volume of Fluid) de HIRT et NICHOLS [139] par exemple, une équation d'advection de la fraction volumique est intégrée, ajoutée à un algorithme de reconstruction géométrique de l'interface. Un autre exemple est celui des méthodes de type Level Set pour le suivi d'interface, accompagnées de la méthode Ghost Fluid de FEDKIW et al. [97] pour traiter les relations de saut (voir la revue du Chapitre 3). Dans tous les cas, les méthodes qui empêchent la diffusion numérique de l'interface permettent d'éviter les problèmes de fermeture thermodynamique inhérents au mélange numérique. Cependant, elles ont bien d'autres inconvénients possibles : non conservativité, incompatibilité avec les maillages non-structurés, difficulté à traiter les écoulements compressibles, ou encore complexité de mise en œuvre.

D.1.3 Solutions utilisant des méthodes à interfaces diffuses

Les méthodes à interfaces diffuses n'effectuent aucun traitement ou suivi de l'interface. En ce sens, elles offrent une plus grande simplicité et généralité. Cependant, lorsqu'elles s'en tiennent à l'hypothèse de fluide homogène (une seule pression et température), elles présentent les problèmes que nous avons évoqués précédemment. Les solutions proposées dans la littérature dans ce contexte sont les suivantes. Tout d'abord, l'analyse d'ABGRALL [1] a permis de montrer que l'oscillation de pression générée peut être reliée à une fonction de γ, en l'occurrence $1/(\gamma - 1)$. Cette observation a conduit au développement de schémas "quasi-conservatifs" incluant une équation d'advection pour la fonction $1/(\gamma - 1)$ (ABGRALL [2]). Cette quantité est alors utilisée pour actualiser la pression à la fin d'un cycle en temps. Ces schémas conservent la masse totale, la quantité de mouvement et l'énergie totale du mélange, mais ne conservent pas la masse de chaque espèce prise individuellement. Par ailleurs, s'ils permettent de conserver la pression constante à travers les discontinuités de contact, ils ont le défaut de générer des erreurs sur la température à l'interface (SAUREL et LEMETAYER [239], JOHNSEN et HAM [152]). L'extension à d'autres équations d'état a été réalisée notamment dans SAUREL et ABGRALL [238], SHYUE [250] et SHYUE [249]. Une approche similaire a été présentée récemment dans le cadre des équations de Navier-Stokes (JOHNSEN et HAM [152]), la loi d'état des gaz parfaits restant sous-jacente.

Parallèlement, une autre approche suivie par KARNI [156] consiste à résoudre les équations d'Euler écrites en variables primitives, sous leur forme non conservative. Les oscillations de pression sont ainsi éliminées, en revanche l'erreur de conservativité limite la validité du schéma aux cas de chocs à faible amplitude. L'extension développée dans KARNI [155] permet d'étendre la validité de l'approche en utilisant la formulation en variables primitives uniquement à travers les discontinuités de contact, et en basculant vers la description conservative ailleurs.

Cette approche nécessite d'intégrer le transport d'une variable de type Level Set pour détecter la présence de l'interface. Une approche encore différente introduite par ABGRALL et KARNI [3], puis étendue ensuite par BILLET et ABGRALL [23], peut être résumée sous l'appellation "schémas à double flux". Lorsqu'un volume de contrôle est détecté comme contenant une certaine quantité d'interface (le critère de détection peut être basé sur les fractions massiques par exemple), alors deux flux différents sont calculés à travers les faces de ce volume de contrôle, en utilisant des valeurs de γ "gelées" de part et d'autre. Il s'agit d'une manière d'éliminer la diffusion numérique sur γ et donc d'éviter la survenue des oscillations de pression. Néanmoins, cette méthode ne conserve pas l'énergie totale, et par ailleurs elle implique de coder des flux non conservatifs, ce qui peut représenter une modification importante pour un code volumes finis déjà existant. Des formulations plus simples ont été proposées, n'impliquant pas de modifier la formulation même des équations, ou bien d'en ajouter. Il s'agit alors de simples corrections locales sur l'énergie interne (JENNY et al. [150]). Ces corrections sont écrites de manière à annuler les oscillations de pression, malheureusement elles violent la conservation de l'énergie totale, et sont donc susceptibles de générer d'autres problèmes : imprécision sur la température, inexactitude des solutions de chocs forts, par exemple. En outre, elles sont spécifiques à la loi d'état des gaz parfaits.

Finalement, les approches les plus complètes qui permettent de décrire correctement les écoulements à interfaces sans remettre en cause la conservativité totale des équations sont les approches purement "multifluides". Le modèle de SAUREL et ABGRALL [237], s'inspirant des travaux de BAER et NUNZIATO [11], intègre des équations de conservation pour la masse, la quantité de mouvement et l'énergie de chaque fluide. La fermeture du système est fournie par une septième équation sur la fraction volumique, d'où l'appellation de modèle à "7 équations" (voir l'établissement du modèle général à 7 équations en § 3.3.1). Cette modélisation conserve toutes les quantités de mélange, en même temps qu'elle élimine les erreurs de reconstruction thermodynamique dues au mélange numérique aux interfaces (SAUREL et LEMETAYER [239]), chaque fluide possédant sa propre loi d'état.

D.2 Analyse d'un cas de référence

Afin d'étudier le phénomène en question dans le cadre précis de la procédure de changement de variables thermodynamiques de CEDRE, nous allons reprendre ici le principe du cas-test évoqué précédemment. Ce cas est utilisé et décrit précisément dans la référence CHARGY et al., Appendix B [38]. On rappelle qu'il s'agit de considérer un problème de Riemann où les deux états de part et d'autre de l'interface sont supersoniques et séparés par une discontinuité de contact. La pression et la vitesse sont donc uniformes à travers l'interface, tandis que la température et la densité peuvent varier. Plus précisément, nous allons considérer deux espèces A et B de nature potentiellement différente de part et d'autre de l'interface. L'objectif est de quantifier l'influence de la différence de température et de la différence de nature des espèces A et B sur l'éventuelle oscillation de pression générée.

De manière pratique, considérons le domaine de calcul illustré par la Figure D.1. Ce domaine est composé d'une unique maille d'épaisseur $\Delta x = 1$ m. Les faces limites "Nord" et "Sud" sont des parois (aucun flux), la face limite "Ouest" représente une entrée supersonique, tandis que la face limite "Est" est une sortie supersonique. La géométrie est unidimensionnelle, le vecteur vitesse est donc décrit uniquement par sa composante normale aux faces "Ouest" et "Est". Le fluide est ici constitué de deux espèces A et B, dont on ne précise pas à ce stade les lois d'état. De plus, le fluide est décrit par le système des équations d'Euler compressibles multi-espèces. Il s'agit simplement du système des équations de Navier-Stokes écrit en (5.29), sans les termes de diffusion et les termes sources. A l'instant t^n, la maille interne contient uniquement l'espèce A, et elle est décrite par les états suivants :

$$\boldsymbol{U}^n = \begin{pmatrix} P^n \\ T^n \\ u^n \\ Y_A^n \\ Y_B^n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_0 \\ T_A \\ u_0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{Q}^n = \begin{pmatrix} (\rho Y_A)^n \\ (\rho Y_B)^n \\ (\rho u)^n \\ (\rho e_t)^n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_A \\ 0 \\ \rho_A u_0 \\ \rho_A \left(e_A + u_0^2/2\right) \end{pmatrix}. \tag{D.3}$$

La cellule limite "Ouest" contient uniquement l'espèce B, avec une pression et une vitesse égales à celles de la maille interne mais une température différente :

$$\boldsymbol{U}^\infty = \begin{pmatrix} P^\infty \\ T^\infty \\ u^\infty \\ Y_A^\infty \\ Y_B^\infty \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_0 \\ T_B \\ u_0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{Q}^\infty = \begin{pmatrix} (\rho Y_A)^\infty \\ (\rho Y_B)^\infty \\ (\rho u)^\infty \\ (\rho e_t)^\infty \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \rho_B \\ \rho_B u_0 \\ \rho_B \left(e_B + u_0^2/2\right) \end{pmatrix}. \tag{D.4}$$

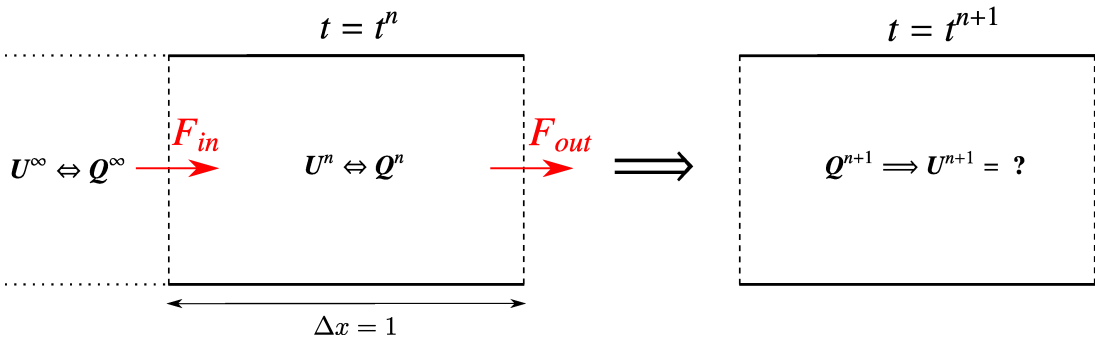


FIGURE D.1 – ***Schéma de principe du cas étudié.***

Tous les termes précédents indicés A, B ou 0 sont des constantes définissant l'état initial t^n. Précisément, nous avons :

$$\rho_A = \rho(A, P_0, T_A) = \text{cste}\,, \qquad \rho_B = \rho(B, P_0, T_B) = \text{cste}\,, \tag{D.5}$$

$$e_A = e(A, P_0, T_A) = \text{cste}\,, \qquad e_B = e(B, P_0, T_B) = \text{cste}\,, \tag{D.6}$$

où $\rho(\bullet, \bullet, \bullet)$ et $e(\bullet, \bullet, \bullet)$ désignent les fonctions lois d'état qui relient la pression et la température à la masse volumique et l'énergie interne de chaque espèce, et qui restent indéfinies à ce stade. La vitesse u_0 est positive (orientée de l'Ouest vers l'Est) et telle que $u_0 > \max(c_A, c_B)$, où $c_A = c(A, P_0, T_A)$ et $c_B = c(A, P_0, T_B)$ désignent respectivement la vitesse du son dans la cellule interne et dans la cellule limite "Ouest". De cette manière, l'écoulement est supersonique à l'entrée comme à la sortie. La résolution du problème de Riemann aux faces est donc simple. Toutes les caractéristiques sont entrantes ou sortantes, et n'importe quel flux numérique décentré s'exprime simplement

$$\phi\left(\boldsymbol{Q}_L, \boldsymbol{Q}_R\right) = \boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{Q}_L\right)\,, \tag{D.7}$$

où $\boldsymbol{Q}_L$ et $\boldsymbol{Q}_R$ sont les états à gauche et à droite d'une interface donnée, et où le flux convectif $\boldsymbol{F}(\bullet)$ est exprimé par la relation (5.26). Plus précisément, en adoptant les notations de la Figure D.1, les flux aux interfaces "Ouest" et "Est", respectivement entrant et sortant, s'expriment :

$$\boldsymbol{F}_{in} = \begin{pmatrix} 0 \\ \rho_B u_0 \\ \rho_B u_0^2 + P_0 \\ \rho_B h_{t,B} u_0 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{F}_{out} = \begin{pmatrix} \rho_A u_0 \\ 0 \\ \rho_A u_0^2 + P_0 \\ \rho_A h_{t,A} u_0 \end{pmatrix}, \tag{D.8}$$

où $h_{t,A} = e_{t,A} + P_0/\rho_A$, $h_{t,B} = e_{t,B} + P_0/\rho_B$ et $e_{t,A} = e_A + u_0^2/2$, $e_{t,B} = e_B + u_0^2/2$ désignent respectivement les enthalpies et énergies totales initiales des espèces A et B. Notons $\nu = u_0 \Delta t/\Delta x$ le nombre CFL. L'avancement en temps du système par un schéma d'Euler explicite s'écrit alors

$$\boldsymbol{Q}^{n+1} = \begin{pmatrix} (\rho Y_A)^{n+1} \\ (\rho Y_B)^{n+1} \\ (\rho u)^{n+1} \\ (\rho e_t)^{n+1} \end{pmatrix} = \boldsymbol{Q}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}\left(\boldsymbol{F}_{out} - \boldsymbol{F}_{in}\right) = \boldsymbol{Q}^n - \nu \begin{pmatrix} \rho_A \\ -\rho_B \\ u_0\left(\rho_A - \rho_B\right) \\ \rho_A h_{t,A} - \rho_B h_{t,B} \end{pmatrix}. \tag{D.9}$$

Explicitons ensuite les différentes composantes du vecteur $\boldsymbol{Q}^{n+1}$, et procédons aux changements de variables $\boldsymbol{Q}^{n+1} \Rightarrow \boldsymbol{U}^{n+1}$ immédiats en utilisant les relations (5.105). Tout d'abord, concernant la masse nous avons :

$$\left.\begin{array}{l} (\rho Y_A)^{n+1} = (1-\nu)\rho_A \\ (\rho Y_B)^{n+1} = \nu\rho_B \end{array}\right\} \Longrightarrow \quad \rho^{n+1} = (1-\nu)\rho_A + \nu\rho_B \quad \Longrightarrow \left\{\begin{array}{l} Y_A^{n+1} = \dfrac{(1-\nu)\rho_A}{(1-\nu)\rho_A + \nu\rho_B} \\ Y_B^{n+1} = \dfrac{\nu\rho_B}{(1-\nu)\rho_A + \nu\rho_B} \end{array}\right. \tag{D.10}$$

Il vient ensuite pour la vitesse :

$$(\rho u)^{n+1} = (1-\nu)\rho_A u_0 + \nu\rho_B u_0 \quad \Longrightarrow \quad u^{n+1} = \frac{(\rho u)^{n+1}}{\rho^{n+1}} \quad \Longrightarrow \quad u^{n+1} = u_0\,. \tag{D.11}$$

La vitesse est donc conservée constante par l'avancement en temps et le processus de changement de variables. En outre, puisque les vitesses et pressions initiales sont uniformes, l'énergie interne actualisée s'obtient facilement à partir de l'énergie totale :

$$(\rho e_t)^{n+1} = (1-\nu)\rho_A e_{t,A} + \nu\rho_B e_{t,B} \Longrightarrow \quad e^{n+1} = \frac{(1-\nu)\rho_A e_A + \nu\rho_B e_B}{(1-\nu)\rho_A + \nu\rho_B} = Y_A^{n+1} e_A + Y_B^{n+1} e_B \,. \tag{D.12}$$

A ce stade il reste à déterminer P^{n+1} et T^{n+1}. Pour cela, nous allons écrire l'algorithme itératif de Newton décrit en § 5.5.2.

D.2.1 Écriture de l'algorithme de Newton

Afin de déterminer les états P^{n+1} et T^{n+1}, la bibliothèque de thermodynamique de CEDRE a recours à un procédé itératif de résolution approchée des différentielles de la pression et de la température. Les différentes expressions nécessaires à sa résolution sont exposées en § 5.5.2. Dans ce paragraphe, et dans le souci d'alléger l'écriture des équations, nous allons adopter les notations suivantes pour exprimer les dérivées partielles utiles à l'algorithme :

$$D_{P\rho} = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_e , \quad D_{Pe} = \left(\frac{\partial P}{\partial e}\right)_\rho , \quad D_{T\rho} = \left(\frac{\partial T}{\partial \rho}\right)_e , \quad D_{Te} = \left(\frac{\partial T}{\partial e}\right)_\rho , \tag{D.13}$$

$$D_{\rho P} = \left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_T , \quad D_{\rho T} = \left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P , \quad D_{eP} = \left(\frac{\partial e}{\partial P}\right)_T , \quad D_{eT} = \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_P . \tag{D.14}$$

Écrivons ensuite l'algorithme de Newton pour une sous-itération quelconque i de l'algorithme :

$$\begin{aligned} P^{i+1} &\approx P^i + \overline{D_{P\rho}}\left(\rho^{n+1} - \overline{\rho}\right) + \overline{D_{Pe}}\left(e^{n+1} - \overline{e}\right), \\ T^{i+1} &\approx T^i + \overline{D_{T\rho}}\left(\rho^{n+1} - \overline{\rho}\right) + \overline{D_{Te}}\left(e^{n+1} - \overline{e}\right). \end{aligned} \tag{D.15}$$

Ici, P^i et T^i sont initialisés à P^n et T^n, puis remplacées au début de chaque sous-itération successive par les valeurs P^{i+1} et T^{i+1} précédemment calculées. Les valeurs P^{n+1} et T^{n+1} sont obtenues lorsque les différences $P^{i+1} - P^i$ et $T^{i+1} - T^i$ deviennent inférieures à la précision souhaitée. La notation $\overline{\bullet}$ désigne une grandeur moyenne pour le mélange, calculée à chaque sous-itération de l'algorithme en fonction de P^i, T^i, Y_A^{n+1} et Y_B^{n+1} :

$$\left\{\overline{\rho}, \overline{e}, \overline{D_{xy}}\right\} = f\left(P^i, T^i, Y_A^{n+1}, Y_B^{n+1}\right) . \tag{D.16}$$

Les termes Y_A^{n+1}, Y_B^{n+1}, ρ^{n+1} et e^{n+1} sont figés au cours de l'exécution de l'algorithme, ils résultent de l'avancement en temps. Dans la mesure où il n'y a pas d'ambiguïté, et pour simplifier l'écriture des équations, nous noterons dans la suite Y_A et Y_B les fractions massiques au temps t^{n+1}. Par ailleurs, nous introduisons également la notation $\bullet^\star$ pour désigner des grandeurs évaluées à P^i et T^i pour les espèces pures :

$$\left\{\rho_A^\star, e_A^\star, D_{xy,A}^\star\right\} = f\left(P^i, T^i, Y_A = 1\right) , \qquad \left\{\rho_B^\star, e_B^\star, D_{xy,B}^\star\right\} = f\left(P^i, T^i, Y_B = 1\right) . \tag{D.17}$$

A ce stade, nous allons faire deux premières hypothèses sur la thermodynamique des espèces A et B :

(i) ***L'espèce A est décrite par la loi d'état des gaz parfaits, et on ne fait pas encore d'hypothèse concernant l'espèce B.***

(ii) ***Les chaleurs spécifiques à pression constante des espèces A et B sont supposées constantes (indépendantes de la température).***

Puisque l'espèce A est de type gaz parfait, sa chaleur spécifique à volume constant est également constante. Si M_A désigne la masse molaire de l'espèce A et R la constante des gaz parfaits, nous avons donc :

$$c_{p,A} = \text{cste} \quad \Rightarrow \quad c_{v,A} = c_{p,A} - \frac{R}{M_A} = \text{cste} \quad \Rightarrow \quad \gamma_A = \frac{c_{p,A}}{c_{v,A}} = \text{cste} \qquad ; \qquad c_{p,B} = \text{cste} \,. \tag{D.18}$$

D.2.1.1 Expression de $e^{n+1} - \overline{e}$ et $\rho^{n+1} - \overline{\rho}$

Les états énergétiques de référence pour les espèces A et B sont définis opportunément à leurs températures et pressions initiales, selon la relation (D.6). Par ailleurs, l'énergie interne est ici une grandeur massique. D'après la relation énergétique (5.114), le terme $\overline{e}$ s'écrit donc

$$\overline{e} = Y_A e_A^\star + Y_B e_B^\star = Y_A\left[e_A + c_{v,A}(T^i - T_A)\right] + Y_B e_B^\star \,, \tag{D.19}$$

et il vient ensuite pour la variation d'énergie interne :

$$e^{n+1} - \overline{e} = Y_B \left(e_B - e_B^\star \right) - Y_A c_{v,A} \left(T^i - T_A \right) . \tag{D.20}$$

Comme expliqué au Chapitre 5 (cf. § 5.5.5), la masse volumique de mélange $\overline{\rho}$ s'obtient indirectement après avoir introduit le facteur $\mathcal{R} = P/(\rho T)$. Nous avons ainsi :

$$\rho_A^\star = \frac{P^i}{P_0}\frac{T_A}{T^i}\rho_A \quad ; \quad \left.\begin{array}{l} \mathcal{R}_A^\star = \dfrac{P^i}{\rho_A^\star T^i} \\ \mathcal{R}_B^\star = \dfrac{P^i}{\rho_B^\star T^i} \end{array}\right\} \quad \Longrightarrow \quad \overline{\mathcal{R}} = Y_A\mathcal{R}_A^\star + Y_B\mathcal{R}_B^\star = \frac{Y_A}{\rho_A}\frac{P_0}{T_A} + \frac{Y_B}{\rho_B^\star}\frac{P^i}{T^i} . \tag{D.21}$$

En posant

$$\sigma^i = \frac{P_0}{P^i}\frac{T^i}{T_A} , \tag{D.22}$$

il vient :

$$\overline{\rho} = \frac{P^i}{\overline{\mathcal{R}}T^i} \quad \Longrightarrow \quad \overline{\rho} = \frac{\rho_A\rho_B^\star}{Y_B\rho_A + \sigma^i Y_A\rho_B^\star} . \tag{D.23}$$

Ensuite, en remarquant que la relation (D.10) induit

$$\left.\begin{array}{rcl} \nu & = & \dfrac{Y_B\rho_A}{Y_B\rho_A + Y_A\rho_B} \\ 1-\nu & = & \dfrac{Y_A\rho_B}{Y_B\rho_A + Y_A\rho_B} \end{array}\right\} \quad \Longrightarrow \quad \rho^{n+1} = \frac{\rho_A\rho_B}{Y_B\rho_A + Y_A\rho_B} , \tag{D.24}$$

la variation de masse volumique s'écrit :

$$\rho^{n+1} - \overline{\rho} = \frac{\rho_A\rho_B}{Y_B\rho_A + Y_A\rho_B} - \frac{\rho_A\rho_B^\star}{Y_B\rho_A + \sigma^i Y_A\rho_B^\star} . \tag{D.25}$$

D.2.1.2 Expression des dérivées partielles $\overline{D_{xy}}$

Suivant la stratégie exposée au paragraphe § 5.5.2 du Chapitre 5, nous commençons par exprimer les dérivées partielles de l'énergie interne et de la masse volumique par rapport à la pression et la température. Nous introduisons également à dessein les termes suivants qui seront utilisés par la suite :

$$\left.\begin{array}{rcl} \lambda_T^i & = & Y_A c_{v,A} + Y_B D_{eT,B}^\star \\ \lambda_P^i & = & Y_B D_{eP,B}^\star \end{array}\right. \quad ; \quad \left.\begin{array}{rcl} \mu_T^i & = & \left(T^i - \overline{\rho} T^{i^2} Y_B D_{\mathcal{R}P,B}^\star \right) \\ \mu_P^i & = & \left(P^i + \overline{\rho} T^{i^2} Y_B D_{\mathcal{R}T,B}^\star \right) \end{array}\right. . \tag{D.26}$$

L'énergie interne de l'espèce A (gaz parfait) ne dépend que de la température, nous avons ainsi :

$$\overline{D_{eT}} = Y_A D_{eT,A}^\star + Y_B D_{eT,B}^\star = Y_A c_{v,A} + Y_B D_{eT,B}^\star = \lambda_T^i , \tag{D.27}$$

$$\overline{D_{eP}} = Y_A D_{eP,A}^\star + Y_B D_{eP,B}^\star = Y_B D_{eP,B}^\star = \lambda_P^i . \tag{D.28}$$

Comme expliqué en § 5.5.5, les dérivées partielles de la masse volumique sont obtenues indirectement à partir de celles de $\mathcal{R}$, que l'on note ici :

$$\left(\frac{\partial\mathcal{R}}{\partial T}\right)_P = D_{\mathcal{R}T} , \qquad \left(\frac{\partial\mathcal{R}}{\partial P}\right)_T = D_{\mathcal{R}P} . \tag{D.29}$$

Puisque A est une espèce de type gaz parfait, il vient pour les grandeurs moyennes :

$$\left\{\begin{array}{l} D_{\mathcal{R}T,A}^\star = 0 \\ D_{\mathcal{R}P,A}^\star = 0 \end{array}\right. \quad \Longrightarrow \quad \left\{\begin{array}{l} \overline{D_{\mathcal{R}T}} = Y_B D_{\mathcal{R}T,B}^\star \\ \overline{D_{\mathcal{R}P}} = Y_B D_{\mathcal{R}P,B}^\star \end{array}\right. . \tag{D.30}$$

Puis, d'après les relations (5.152) et (5.153) du Chapitre 5 :

$$\left.\begin{array}{rcl} \overline{D_{\rho T}} & = & -\dfrac{\overline{\rho}}{T^i}\left(1 + \dfrac{T^i}{\overline{\mathcal{R}}}\overline{D_{\mathcal{R}T}}\right) = -\dfrac{\overline{\rho}}{P^i T^i}\left(P^i + \overline{\rho}T^{i^2}Y_B D_{\mathcal{R}T,B}^\star\right) \\ \overline{D_{\rho P}} & = & \dfrac{\overline{\rho}}{P^i}\left(1 - \dfrac{P^i}{\overline{\mathcal{R}}}\overline{D_{\mathcal{R}P}}\right) = \dfrac{\overline{\rho}}{P^i T^i}\left(T^i - \overline{\rho}T^{i^2}Y_B D_{\mathcal{R}P,B}^\star\right) \end{array}\right. \quad \Longrightarrow \quad \left\{\begin{array}{l} \overline{D_{\rho T}} = -\dfrac{\overline{\rho}}{P^i T^i}\mu_P^i \\ \overline{D_{\rho P}} = \dfrac{\overline{\rho}}{P^i T^i}\mu_T^i \end{array}\right. . \tag{D.31}$$

En posant

$$\omega^i = \frac{1}{\mu_T^i \lambda_T^i + \mu_P^i \lambda_P^i}\,, \tag{D.32}$$

l'expression du déterminant $\overline{\Delta}$ est alors

$$\overline{\Delta} = \overline{D_{\rho P}}\,\overline{D_{eT}} - \overline{D_{\rho T}}\,\overline{D_{eP}} \quad \Longrightarrow \quad \overline{\Delta} = \frac{\overline{\rho}}{P^i T^i}\left(\mu_T^i \lambda_T^i + \mu_P^i \lambda_P^i\right) \quad \Longrightarrow \quad \frac{1}{\overline{\Delta}} = \omega^i \frac{P^i T^i}{\overline{\rho}}\,. \tag{D.33}$$

Nous obtenons ensuite les dérivées partielles de P et T par rapport à ρ et e :

$$\begin{aligned}
\overline{D_{P\rho}} &= \frac{1}{\overline{\Delta}}\overline{D_{eT}} \quad \Longrightarrow \quad \overline{D_{P\rho}} = \frac{P^i T^i}{\overline{\rho}}\lambda_T^i \omega^i\,,\\
\overline{D_{T\rho}} &= -\frac{1}{\overline{\Delta}}\overline{D_{eP}} \quad \Longrightarrow \quad \overline{D_{T\rho}} = -\frac{P^i T^i}{\overline{\rho}}\lambda_P^i \omega^i\,,\\
\overline{D_{Pe}} &= -\frac{1}{\overline{\Delta}}\overline{D_{\rho T}} \quad \Longrightarrow \quad \overline{D_{Pe}} = \mu_P^i \omega^i\,,\\
\overline{D_{Te}} &= \frac{1}{\overline{\Delta}}\overline{D_{\rho P}} \quad \Longrightarrow \quad \overline{D_{Te}} = \mu_T^i \omega^i\,.
\end{aligned} \tag{D.34}$$

Si l'on pose encore :

$$Q_e^i = e^{n+1} - \overline{e} = Y_B\left(e_B - e_B^\star\right) - Y_A c_{v,A}\left(T^i - T_A\right)\,, \tag{D.35}$$

$$Q_\rho^i = \frac{\rho^{n+1} - \overline{\rho}}{\overline{\rho}} = \frac{Y_B \rho_A\left(\dfrac{\rho_B}{\rho_B^\star} - 1\right) + Y_A \rho_B\left(\sigma^i - 1\right)}{Y_B \rho_A + Y_A \rho_B}\,, \tag{D.36}$$

l'expression d'une sous-itération quelconque de l'algorithme de Newton peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\left(\Delta T\right)^{i+1} = T^{i+1} - T^i = \omega^i\left(\mu_T^i Q_e^i - \lambda_P^i P^i T^i Q_\rho^i\right), \tag{D.37}$$

$$\left(\Delta P\right)^{i+1} = P^{i+1} - P^i = \omega^i\left(\mu_P^i Q_e^i + \lambda_T^i P^i T^i Q_\rho^i\right). \tag{D.38}$$

Par ailleurs, nous introduisons ici des termes adimensionnés qui seront utilisés par la suite. Les termes f_T^{i+1} et f_P^{i+1} désignent les rapports entre deux itérations successives de l'algorithme, en température et en pression respectivement :

$$f_T^{i+1} = \frac{T^{i+1}}{T^i} = 1 + \omega^i\left(\frac{\mu_T^i}{T^i} Q_e^i - \lambda_P^i P^i Q_\rho^i\right), \tag{D.39}$$

$$f_P^{i+1} = \frac{P^{i+1}}{P^i} = 1 + \omega^i\left(\frac{\mu_P^i}{P^i} Q_e^i + \lambda_T^i T^i Q_\rho^i\right). \tag{D.40}$$

Les termes f_T^∞ et f_P^∞ désignent les rapports entre les valeurs convergées et les valeurs initiales de l'algorithme :

$$f_T^\infty = \frac{T^{n+1}}{T^n} = \frac{T^{n+1}}{T^A}\,, \tag{D.41}$$

$$f_P^\infty = \frac{P^{n+1}}{P^n} = \frac{P^{n+1}}{P_0}\,. \tag{D.42}$$

On rappelle que les valeurs convergées T^{n+1} et P^{n+1} sont obtenues lorsqu'à une itération i donnée, les termes $\left|f_T^{i+1} - 1\right|$ et $\left|f_P^{i+1} - 1\right|$ sont inférieurs à un critère de convergence donné. A ce stade, il convient d'affecter une loi d'état à l'espèce B afin de poursuivre l'analyse.

D.2.2 Cas où l'espèce B est de type gaz parfait

L'hypothèse suivante est maintenant ajoutée :

(iii) ***L'espèce B suit la loi d'état des gaz parfaits, décrite en § 5.5.3.***

A ce stade, les lois d'état des deux espèces sont définies, en l'occurrence A et B sont toutes les deux de type gaz parfait. Dans cette configuration, il est assez simple d'écrire le comportement de l'algorithme de Newton itération après itération. Nous allons voir en effet qu'il converge rapidement et de manière exacte. On peut alors identifier sous quelles conditions des oscillations de pression peuvent être générées.

D.2.2.1 Expression d'une sous-itération quelconque

En premier lieu, exprimons les différents termes $\bullet_B^\star$ en utilisant le fait que B est un gaz parfait :

$$\left\{\begin{array}{rcl} e_B^\star &=& e_B + c_{v,B}\left(T^i - T_B\right) \\ \rho_B^\star &=& \dfrac{\rho_B}{\sigma^i}\dfrac{T_B}{T_A} \end{array}\right. \quad\Longrightarrow\quad \left\{\begin{array}{rcl} \overline{\rho} &=& \dfrac{\rho_A\rho_B}{\sigma^i\left(Y_A\rho_B + \dfrac{T_A}{T_B}Y_B\rho_A\right)} \\ Q_e^i &=& -Y_A c_{v,A}\left(T^i - T_A\right) - Y_B c_{v,B}\left(T^i - T_B\right) \\ Q_\rho^i &=& \dfrac{Y_B\rho_A\left(\sigma^i\dfrac{T_A}{T_B} - 1\right) + Y_A\rho_B\left(\sigma^i - 1\right)}{Y_B\rho_A + Y_A\rho_B} \end{array}\right. . \tag{D.43}$$

Il vient alors :

$$\left\{\begin{array}{rcl} D_{eT,B}^\star &=& c_{v,B} \\ D_{eP,B}^\star &=& 0 \\ D_{\mathcal{R}T,B}^\star &=& 0 \\ D_{\mathcal{R}P,B}^\star &=& 0 \end{array}\right. \Longrightarrow \left\{\begin{array}{rcl} \lambda_T^i &=& Y_A c_{v,A} + Y_B c_{v,B} \\ \lambda_P^i &=& 0 \\ \mu_T^i &=& T^i \\ \mu_P^i &=& P^i \end{array}\right. \Longrightarrow \quad \omega^i = \frac{1}{T^i\left(Y_A c_{v,A} + Y_B c_{v,B}\right)} . \tag{D.44}$$

L'expression (D.37) d'une sous-itération quelconque de l'algorithme de calcul de la température devient :

$$T^{i+1} - T^i \;=\; \omega^i\mu_T^i Q_e^i \;=\; -\frac{Y_A c_{v,A}\left(T^i - T_A\right) + Y_B c_{v,B}\left(T^i - T_B\right)}{Y_A c_{v,A} + Y_B c_{v,B}} . \tag{D.45}$$

Et nous obtenons pour la pression, d'après la relation (D.38) :

$$\frac{P^{i+1} - P^i}{P^i} \;=\; \omega^i\left(Q_e^i + \lambda_T^i T^i Q_\rho^i\right) \;=\; \frac{T^{i+1} - T^i}{T^i} + Q_\rho^i . \tag{D.46}$$

Les premières itérations de l'algorithme peuvent alors être explicitées. Afin de simplifier encore l'écriture, l'hypothèse suivante est ajoutée [1] :

(iv) ***Le pas de temps et donc le nombre CFL ν sont choisis de manière à ce que les fractions massiques au temps t^{n+1} soient égales.***

D'après la relation (D.10) qui permet d'exprimer ν en fonction des fractions massiques au temps t^{n+1}, ceci implique :

$$Y_A = Y_B = \frac{1}{2} \quad\Longrightarrow\quad \nu \;=\; \frac{Y_B\rho_A}{Y_B\rho_A + Y_A\rho_B} \;=\; \frac{\rho_A}{\rho_A + \rho_B} . \tag{D.47}$$

Nous introduisons également les paramètres suivants, indépendants de la sous-itération i courante :

$$k_c = \frac{c_{v,B}}{c_{v,A} + c_{v,B}} , \quad k_\rho = \frac{\rho_B}{\rho_A + \rho_B} , \quad k_T = \frac{T_B - T_A}{T_A} . \tag{D.48}$$

1. Cette hypothèse n'est faite que pour simplifier l'écriture des équations. Il est tout à fait possible de conserver un pas de temps quelconque, et donc les fractions massiques dans les équations. Cela conduit à des relations plus générales, mais sans changer la nature du phénomène que l'on souhaite mettre en évidence : la survenue éventuelle d'oscillations de pression.

D.2.2.2 Expression de la première itération ($i = 0$)

A la première itération, nous avons $T^0 = T_A$ et $P^0 = P_0$. Il vient alors pour la température :

$$T^1 \;=\; k_c T_B + (1 - k_c)\, T_A \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{T^1}{T_A} \;=\; 1 + k_c k_T \;=\; f_T^1\left(k_c, k_T\right) \,. \tag{D.49}$$

De même pour la pression, nous obtenons :

$$\frac{P^1}{P_0} \;=\; 1 + \frac{T^1 - T_A}{T_A} + \frac{k_T}{k_T + 1}\left(k_\rho - 1\right) \;=\; 1 + k_T\left(k_c + \frac{k_\rho - 1}{k_T + 1}\right) \;=\; f_P^1\left(k_c, k_\rho, k_T\right) \,. \tag{D.50}$$

Les remarques suivantes peuvent être faites :

- $k_c \in [0, 1]$, par conséquent T^1 est une combinaison convexe de T_A et T_B :

$$T^1 \in \left[\min\left(T_A, T_B\right), \max\left(T_A, T_B\right)\right] . \tag{D.51}$$

- dès lors que $T_A \neq T_B$, nous avons en général $P^1 \neq P_0$, et donc une oscillation de pression est générée à la première sous-itération de l'algorithme. Nous allons voir cependant que cette oscillation est annulée à la deuxième sous-itération sous certaines conditions.

D.2.2.3 Expression de la deuxième itération ($i = 1$)

A la deuxième itération, nous avons pour la température :

$$T^2 - T^1 \;=\; k_c\left(T_B - T^1\right) + (1 - k_c)\left(T_A - T^1\right) \,. \tag{D.52}$$

En introduisant l'expression de T^1 calculée précédemment, on montre en quelques lignes de calcul que

$$T^2 \;=\; T^1 \,. \tag{D.53}$$

Concernant la pression, on démontre également en quelques lignes de calcul que

$$\frac{P^2}{P_0} \;=\; \frac{\left(1 + k_c\, k_T\right)\left(1 + k_\rho\, k_T\right)}{1 + k_T} \;=\; f_P^2\left(k_c, k_\rho, k_T\right) \,. \tag{D.54}$$

D.2.2.4 Expression de la troisième itération ($i = 2$)

L'algorithme est déjà convergé en température, nous obtenons immédiatement :

$$T^3 = T^2 = T^1 \,. \tag{D.55}$$

Pour la pression, il suit :

$$\frac{P^3 - P^2}{P^2} = Q_\rho^2 = \left(1 - k_\rho\right)\left(\frac{\sigma^2}{k_T + 1} - 1\right) + k_\rho\left(\sigma^2 - 1\right) \,. \tag{D.56}$$

Par ailleurs :

$$\sigma^2 = \frac{P_0}{P^2}\frac{T^2}{T_A} = \frac{1 + k_c\, k_T}{f_P^2\left(k_c, k_\rho, k_T\right)} = \frac{1 + k_T}{1 + k_\rho\, k_T} \,. \tag{D.57}$$

On montre alors en quelques lignes que $Q_\rho^2 = 0$ et on obtient donc :

$$P^3 \;=\; P^2 \,. \tag{D.58}$$

L'algorithme est ainsi convergé en pression dès la deuxième itération.

D.2.2.5 Conclusions

En conclusion, nous pouvons faire les remarques suivantes dans le cas où A et B sont deux espèces de type gaz parfait :

– l'algorithme est convergé en température dès la première sous-itération, et donc :

$$T^{n+1} = T^1 \quad \Leftrightarrow \quad \frac{T^{n+1}}{T_A} = 1 + k_c k_T = f_T^{\infty}(k_c, k_T) = f_T^1(k_c, k_T) \ . \tag{D.59}$$

– l'algorithme est convergé en pression dès la deuxième sous-itération, et donc :

$$P^{n+1} = P^2 \quad \Leftrightarrow \quad \frac{P^{n+1}}{P_0} = \frac{\left(1 + k_c\, k_T\right)\left(1 + k_\rho\, k_T\right)}{1 + k_T} = f_P^{\infty}\left(k_c, k_\rho, k_T\right) = f_P^2\left(k_c, k_\rho, k_T\right) \ . \tag{D.60}$$

– pour savoir si une oscillation de pression est générée et quelle est son amplitude éventuelle, il suffit d'étudier la fonction $f_P^{\infty}\left(k_c, k_\rho, k_T\right)$.

Par ailleurs, A et B étant de type gaz parfait, il est possible d'exprimer k_c et k_ρ en termes de rapports des masses molaires et des coefficients isentropiques. Introduisons les termes suivants :

$$\widetilde{T} = \frac{T_B}{T_A} \ , \qquad \widetilde{M} = \frac{M_B}{M_A} \ , \qquad \widetilde{\gamma} = \frac{\gamma_B - 1}{\gamma_A - 1} \ . \tag{D.61}$$

On a alors :

$$k_c = \frac{1}{1 + \widetilde{M}\widetilde{\gamma}} \ , \qquad k_\rho = \frac{\widetilde{M}}{\widetilde{M} + \widetilde{T}} \ , \qquad k_T = \widetilde{T} - 1 \ . \tag{D.62}$$

Les fonctions f_T^{∞}, f_P^1 et f_P^{∞} se réécrivent :

$$f_T^{\infty}\left(\widetilde{M}, \widetilde{\gamma}, \widetilde{T}\right) = \frac{\widetilde{T} + \widetilde{M}\widetilde{\gamma}}{1 + \widetilde{M}\widetilde{\gamma}} \ , \tag{D.63}$$

$$f_P^1\left(\widetilde{M}, \widetilde{\gamma}, \widetilde{T}\right) = 1 + \left(1 - \widetilde{T}\right)\left(\frac{1}{\widetilde{M} + \widetilde{T}} - \frac{1}{1 + \widetilde{M}\widetilde{\gamma}}\right) \ , \tag{D.64}$$

$$f_P^{\infty}\left(\widetilde{M}, \widetilde{\gamma}, \widetilde{T}\right) = \frac{1 + \widetilde{M}}{1 + \widetilde{M}\widetilde{\gamma}} \, \frac{\widetilde{T} + \widetilde{M}\widetilde{\gamma}}{\widetilde{T} + \widetilde{M}} \ . \tag{D.65}$$

Sous cette forme, on constate très clairement sous quelles conditions l'algorithme génère ou ne génère pas d'oscillation de pression :

– $\forall\, \widetilde{M},\ \forall\, \widetilde{\gamma},$ si $\widetilde{T} = 1 \Longrightarrow f_T^{\infty} = f_P^1 = f_P^{\infty} = 1 \Longrightarrow T^{n+1} = T^1 = T_A,\ P^{n+1} = P^2 = P^1 = P_0$.
Si la température est initialement uniforme, la pression et la température restent uniformes quelles que soient les masses molaires ou les coefficients isentropiques des espèces A et B.

– $\forall\, \widetilde{M},\ \forall\, \widetilde{\gamma},$ si $\widetilde{T} \neq 1 \Longrightarrow f_P^1 \neq 1 \Longrightarrow P^1 \neq P_0$.
Si les températures initiales sont différentes, alors quels que soient $\widetilde{M}$ et $\widetilde{\gamma}$, notamment même si $\widetilde{M} = 1$ et $\widetilde{\gamma} = 1$ (A et B sont la même espèce), une oscillation de pression est générée à la première sous-itération de l'algorithme [2].

– $\forall\, \widetilde{M},\ \forall \widetilde{T},$ si $\widetilde{\gamma} = 1 \Longrightarrow f_P^{\infty} = 1 \Longrightarrow P^{n+1} = P^2 = P_0$.
Cependant, si les deux espèces possèdent des coefficients isentropiques égaux, alors quel que soit le rapport de leurs masses molaires et quelle que soit la différence de température initiale, la pression reste uniforme une fois l'algorithme convergé. En d'autres termes, dans ce cas de figure, la seconde sous-itération de l'algorithme annule toujours l'oscillation générée par la première sous-itération.

– $\forall\, \widetilde{M},\ \forall \widetilde{T} \neq 1,\ \forall \widetilde{\gamma} \neq 1 \Longrightarrow f_P^{\infty} \neq 1 \Longrightarrow P^{n+1} = P^2 \neq P_0$.
Quel que soit le rapport des masses molaires, si les températures initiales ne sont pas uniformes, et si les coefficients isentropiques sont différents, alors une oscillation de pression est introduite sur la valeur convergée. Son amplitude et son signe dépendent des valeurs prises par $\widetilde{M}$, $\widetilde{\gamma}$ et $\widetilde{T}$.

Les fonctions f_T^{∞}, f_P^1 et f_P^{∞} sont tracées sur les Figure D.2 à Figure D.7 pour différentes valeurs de $\widetilde{M}$, $\widetilde{\gamma}$, et $\widetilde{T}$. En complément des remarques précédentes, on constate ainsi que l'amplitude de l'oscillation de pression générée est directement proportionnelle au rapport des coefficients isentropiques γ_A et γ_B. A titre d'information, le même type d'analyse a déjà été faite dans plusieurs références de la littérature, sans toutefois l'usage d'un algorithme de

2. A l'exception du cas particulier où $\widetilde{T} = 1 + \widetilde{M}\,(\widetilde{\gamma} - 1)$ pour $\widetilde{\gamma} \neq 1$. Dans ce cas précis, $f_P^1\left(\widetilde{M}, \widetilde{\gamma}, \widetilde{T}\right) = 1$ (voir les Figure D.3 et Figure D.6).

Newton [3], [4]. Les conclusions sont néanmoins similaires :

> L'utilisation de schémas numériques décentrés, **strictement conservatifs**, pour résoudre les équations d'Euler compressibles **multi-espèces**, ne permet pas de décrire correctement les discontinuités de contact entre des espèces de nature thermodynamique différente. Plus précisément, même dans le cas d'espèces de type gaz parfaits, une simple différence entre les coefficients isentropiques suffit à générer des oscillations de pression, qui induisent ensuite des oscillations de vitesse.

Nous allons voir dans la section suivante que ce phénomène existe aussi, et est même amplifié, dans le cas d'espèces de natures différentes, telles une espèce de type "gaz parfait" et une espèce de type "liquide compressible".

D.2.3 Cas où l'espèce B est de type liquide compressible

Mettons maintenant de côté le paragraphe § D.2.2 et faisons l'hypothèse suivante :

(iii) ***L'espèce B suit la loi d'état de liquide compressible, décrite en § 5.5.4.***

Puis écrivons l'expression d'une sous-itération quelconque.

D.2.3.1 Expression d'une sous-itération quelconque

Par commodité, introduisons tout d'abord les expressions suivantes :

$$A^i = 1 + \alpha_0 \left(T^i - T_B\right) , \qquad \overline{\alpha} = 1 - \alpha_0 T_B = A^i - \alpha_0 T^i , \tag{D.66}$$

$$B^i = 1 + \beta_0 \left(P^i - P_0\right) , \qquad \overline{\beta} = 1 - \beta_0 P_0 = B^i - \beta_0 P^i . \tag{D.67}$$

D'après les différentes relations du paragraphe § 5.5.4 au Chapitre 5, les termes $e_B^\star$ et $\rho_B^\star$ se réécrivent :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} e_B^\star & = & e_B + c_{p,B}\left(T^i - T_B\right) + \dfrac{\overline{\alpha}}{\beta_0\,\rho_B} \ln\left(B^i\right) + \dfrac{1}{\rho_B}\left(P_0 - P^i \dfrac{A^i}{B^i}\right) \\ \rho_B^\star & = & \rho_B \dfrac{B^i}{A^i} \end{array} \right. . \tag{D.68}$$

Il vient alors :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \overline{\rho} & = & \dfrac{\rho_A \rho_B}{\sigma^i Y_A \rho_B + \dfrac{A^i}{B^i} Y_B \rho_A} \\ Q_e^i & = & -Y_A c_{v,A}\left(T^i - T_A\right) - Y_B \left[c_{p,B}\left(T^i - T_B\right) + \dfrac{\overline{\alpha}}{\beta_0\,\rho_B} \ln\left(B^i\right) + \dfrac{1}{\rho_B}\left(P_0 - P^i \dfrac{A^i}{B^i}\right) \right] \\ Q_\rho^i & = & \dfrac{Y_B \rho_A \left(\dfrac{A^i}{B^i} - 1\right) + Y_A \rho_B \left(\sigma^i - 1\right)}{Y_B \rho_A + Y_A \rho_B} \end{array} \right. . \tag{D.69}$$

3. Dans CHARGY et al., Appendix B [38], on trouve des figures qui relient l'amplitude des oscillations de pression à la différence des coefficients isentropiques entre deux gaz parfaits.

4. Dans JENNY et al. [150], la relation (8) est équivalente à la relation (D.65) de cette annexe pour f_P^∞, si l'on met en commun les hypothèses du cas étudié dans ce papier (continuité de la masse volumique, ce qui implique ici $\rho_A = \rho_B$ et donc $\widetilde{M} = \widetilde{T}$) avec celles utilisées ici (pas de temps choisi tel que $Y_A = Y_B = 1/2$, ce qui implique dans l'expression de la référence précédente $\sigma = 1 - \sigma = 1/2$, où σ désigne le nombre CFL que nous avons noté ν ici).

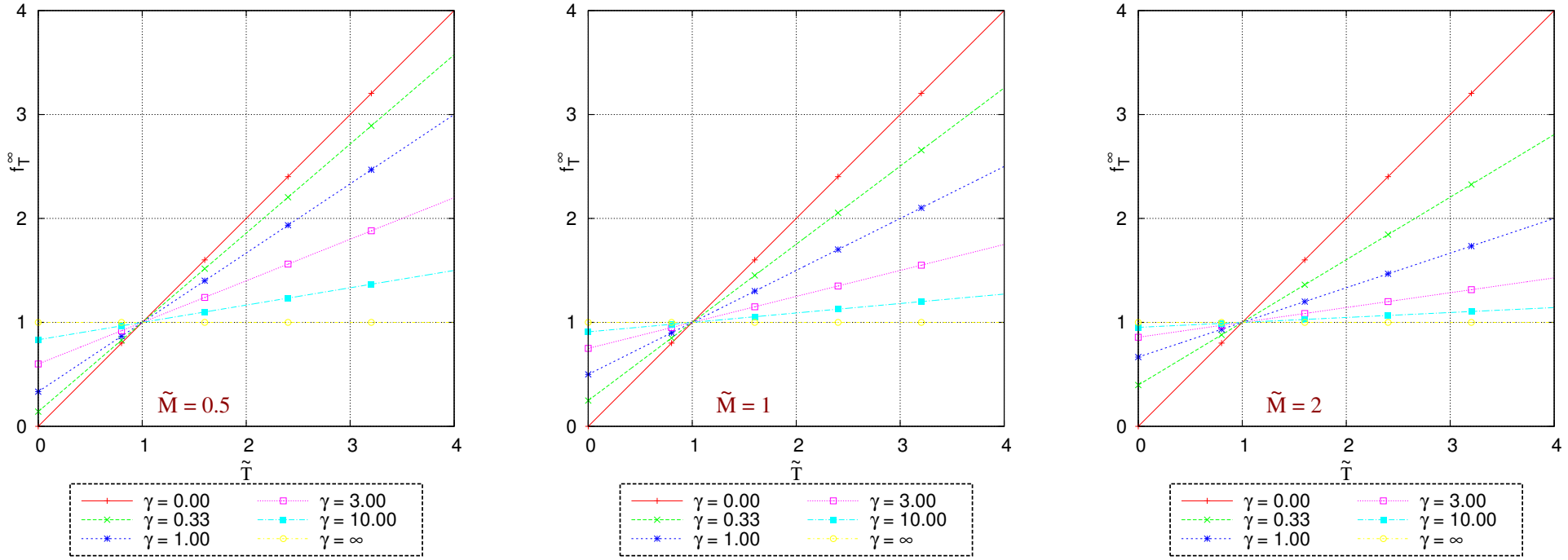


FIGURE D.2 – ***Fonction*** $f_T^\infty\left(\widetilde{M},\widetilde{\gamma},\widetilde{T}\right)$ ***(échelle linéaire).***

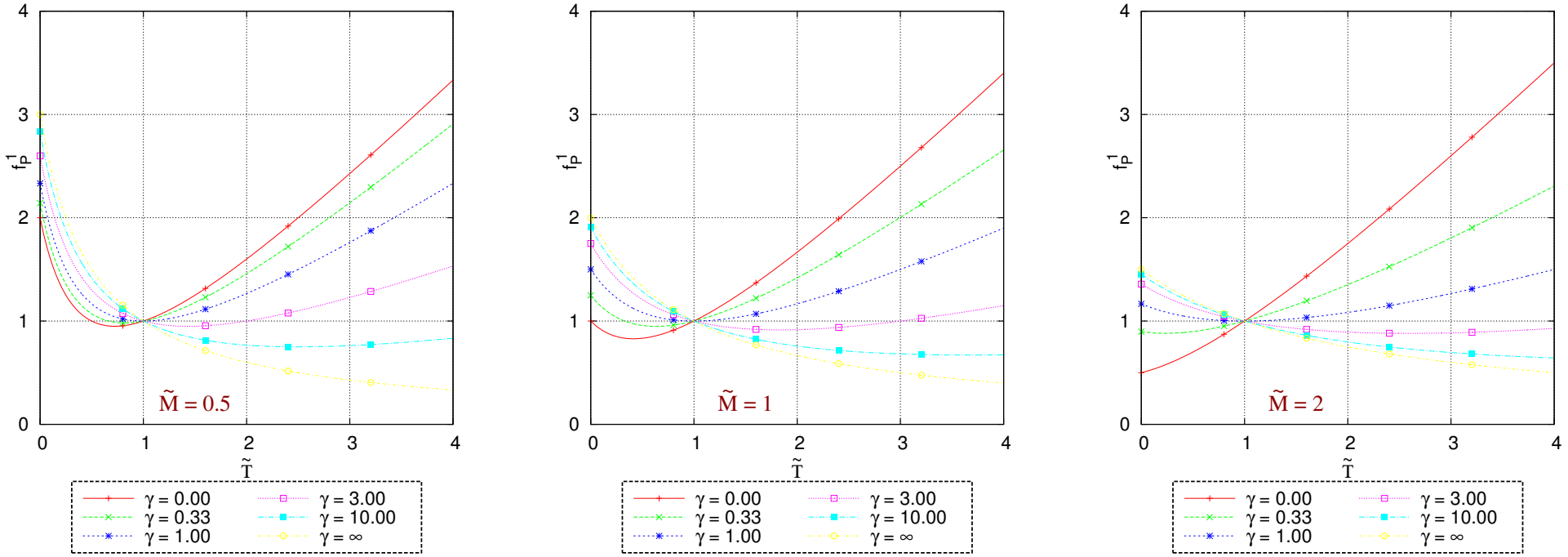


FIGURE D.3 – ***Fonction*** $f_P^1\left(\widetilde{M},\widetilde{\gamma},\widetilde{T}\right)$ ***(échelle linéaire).***

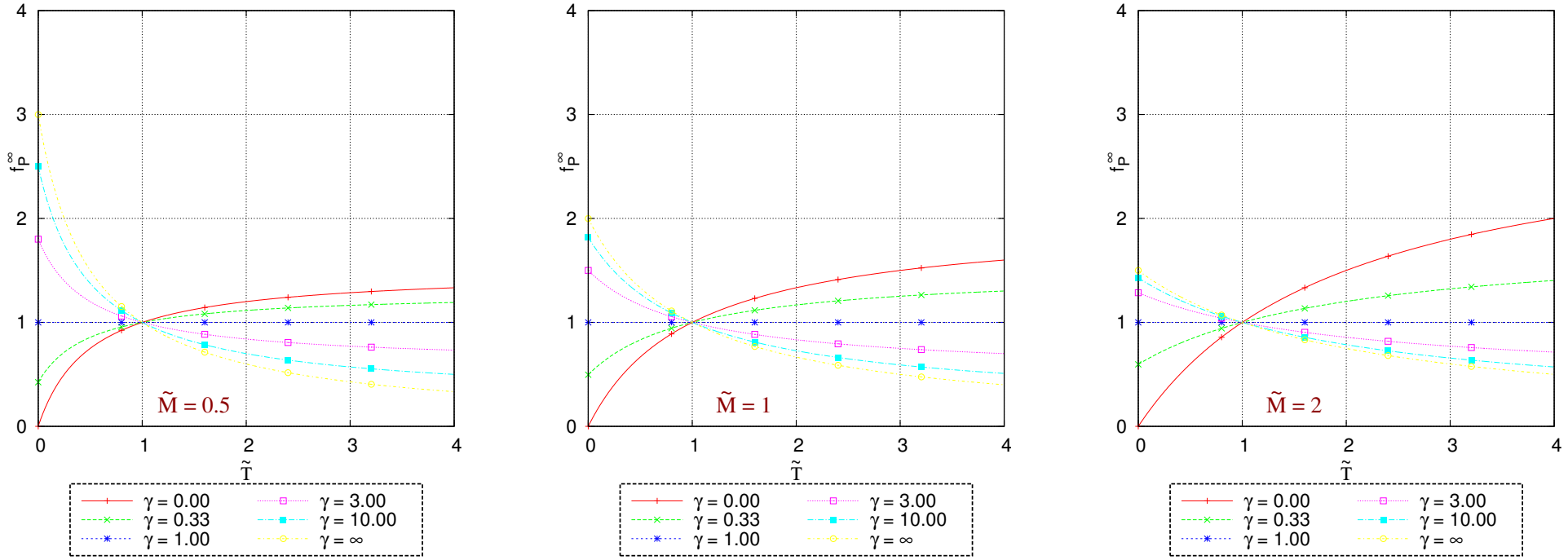


FIGURE D.4 – ***Fonction*** $f_P^\infty\left(\widetilde{M},\widetilde{\gamma},\widetilde{T}\right)$ ***(échelle linéaire).***

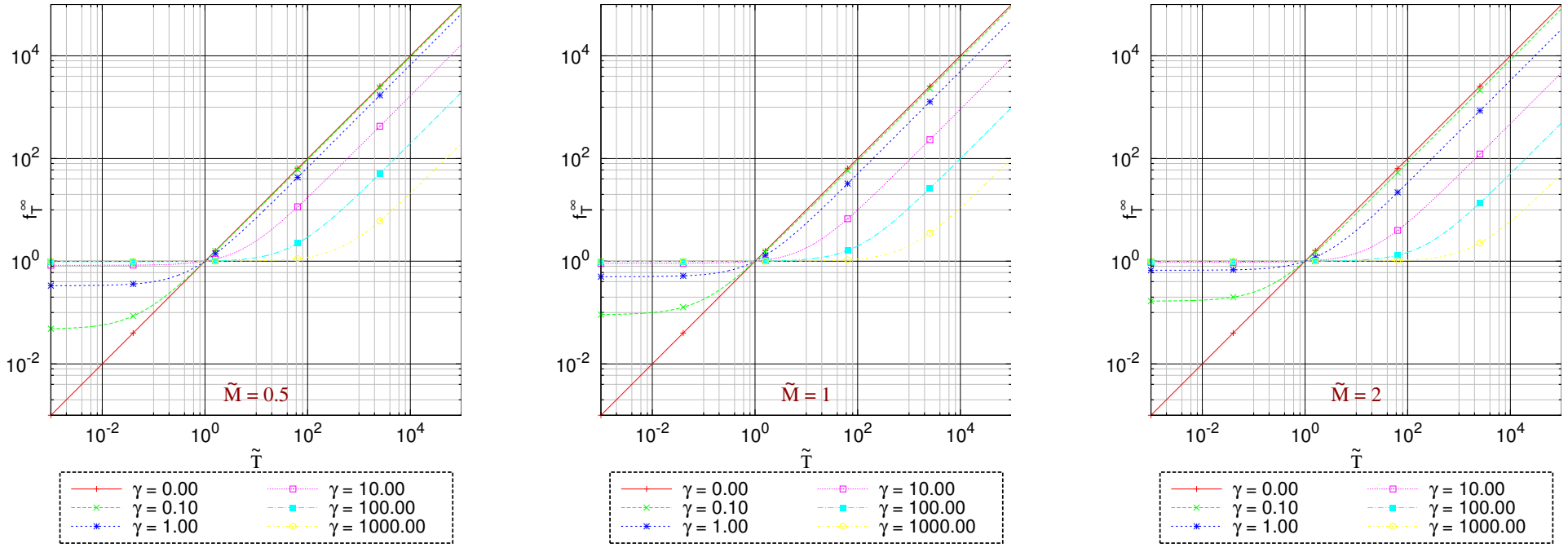


FIGURE D.5 – ***Fonction*** $f_T^\infty\left(\widetilde{M},\widetilde{\gamma},\widetilde{T}\right)$ ***(échelle logarithmique).***

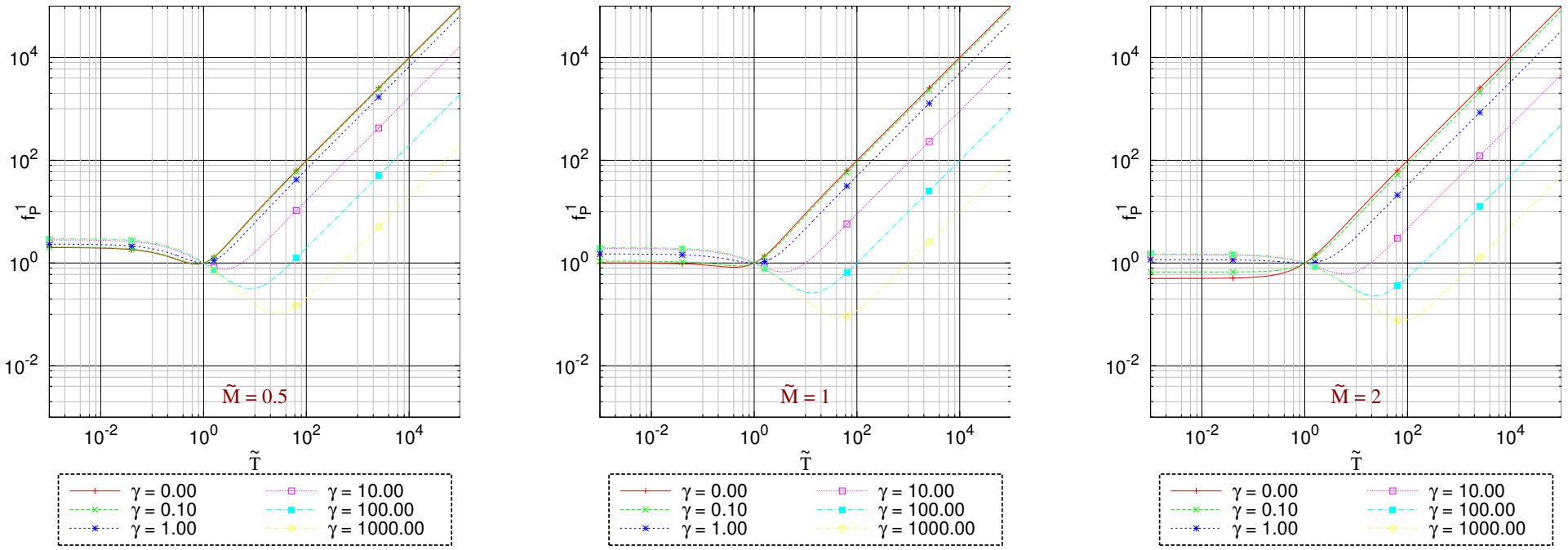


FIGURE D.6 – ***Fonction*** $f_P^1\left(\widetilde{M},\widetilde{\gamma},\widetilde{T}\right)$ ***(échelle logarithmique).***

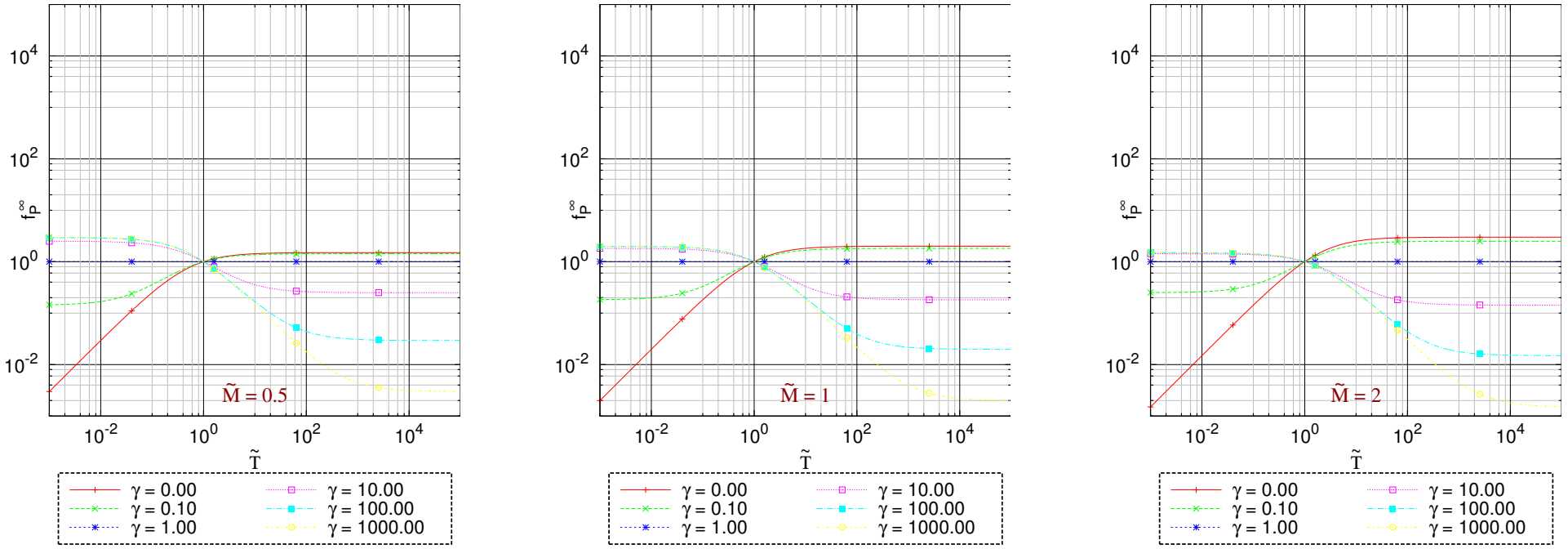


FIGURE D.7 – ***Fonction*** $f_P^\infty\left(\widetilde{M},\widetilde{\gamma},\widetilde{T}\right)$ ***(échelle logarithmique).***

Concernant les dérivées partielles nous avons :

$$\left\{\begin{array}{lcl} D^{\star}_{eT,B} &=& c_{p,B} - \dfrac{P^i}{B^i}\dfrac{\alpha_0}{\rho_B} \\ D^{\star}_{eP,B} &=& \dfrac{\overline{\alpha}B^i - \overline{\beta}A^i}{\rho_B {B^i}^2} \\ D^{\star}_{\mathcal{R}T,B} &=& -\dfrac{\overline{\alpha}P^i}{\rho_B B^i {T^i}^2} \\ D^{\star}_{\mathcal{R}P,B} &=& \dfrac{\overline{\beta}A^i}{T^i \rho_B {B^i}^2} \end{array}\right. \Longrightarrow \left\{\begin{array}{lcl} \lambda^i_T &=& Y_A c_{v,A} + Y_B\left(c_{p,B} - \dfrac{P^i}{B^i}\dfrac{\alpha_0}{\rho_B}\right) \\ \lambda^i_P &=& Y_B \dfrac{\overline{\alpha}B^i - \overline{\beta}A^i}{\rho_B {B^i}^2} \\ \mu^i_T &=& T^i\left(1 - \overline{\beta}J^i\dfrac{A^i}{B^i}\right) \\ \mu^i_P &=& P^i\left(1 - \overline{\alpha}J^i\right) \end{array}\right. , \tag{D.70}$$

où nous avons posé :

$$J^i = \frac{Y_B \rho_A}{A^i Y_B \rho_A + \sigma^i B^i Y_A \rho_B} . \tag{D.71}$$

Nous avons également :

$$\frac{1}{\omega^i} = T^i\left(1 - \overline{\beta}J^i\frac{A^i}{B^i}\right)\left(Y_A c_{v,A} + Y_B\left[c_{p,B} - \frac{P^i}{B^i}\frac{\alpha_0}{\rho_B}\right]\right) + P^i\left(1 - \overline{\alpha}J^i\right)Y_B\frac{\overline{\alpha}B^i - \overline{\beta}A^i}{\rho_B {B^i}^2} . \tag{D.72}$$

L'expression d'une itération quelconque de l'algorithme pour la température et la pression s'obtient alors en remplaçant les expressions précédentes dans les relations (D.37) et (D.38).

D.2.3.2 Évaluation des itérations successives

Nous n'allons pas détailler ici l'expression analytique des itérations successives de l'algorithme. Leur dérivation exacte serait fastidieuse, et il n'est pas garanti que l'on puisse montrer une convergence exacte comme dans le cas où l'espèce B est de type gaz parfait. Afin de quantifier le comportement de l'algorithme de Newton (vitesse de convergence, amplitude des oscillations de pression générées), l'utilisation d'un logiciel de calcul formel est plus appropriée. Pour cela, nous allons devoir attribuer des valeurs numériques aux paramètres physiques qui interviennent dans l'algorithme.

Nous fixons tout d'abord un jeu de données numériques pour l'espèce B (voir le Tableau D.1), caractéristique des paramètres physiques de l'oxygène liquide dans les applications qui nous intéressent. De même, nous définissons deux jeux de données différents pour l'espèce A, caractérisant d'une part un cas "à froid" avec de l'hydrogène (cf. Tableau D.2), et d'autre part un cas "à feu" avec de la vapeur d'eau (cf. Tableau D.3). Deux combinaisons sont donc possibles, et définissent deux cas-tests différents : ***LOx-H₂*** et ***LOx-H₂O***. Par ailleurs, la pression est une donnée commune valant $P_0 = 10^6$, et nous sommes toujours dans le cadre de l'hypothèse d'un critère CFL (et donc d'un pas de temps) choisi de telle sorte que $Y_A = Y_B = 1/2$ à la fin du premier cycle en temps.

T_B	$c_{p,B}$	ρ_B	α_0	β_0
85	1684	1168	$4,12\cdot10^{-3}$	$1,71\cdot10^{-9}$

TABLEAU D.1 – ***Jeu de données pour l'espèce B "LOx".***

T_A	$c_{v,A}$	M_A
300	10193	$2,02\cdot10^{-3}$

TABLEAU D.2 – ***Jeu de données pour l'espèce A "H_2".***

T_A	$c_{v,A}$	M_A
2000	1835	$18,0\cdot10^{-3}$

TABLEAU D.3 – ***Jeu de données pour l'espèce A "H_2O".***

Les jeux de données des Tableau D.1 à Tableau D.3 étant fixés, il est possible de calculer à l'aide d'un logiciel de calcul formel les valeurs successives prises par la température et la pression au cours de l'exécution de l'algorithme de Newton. La convergence est supposée atteinte lorsque à une itération i donnée nous avons

$$\left|f_T^{i+1} - 1\right| \leq \epsilon \quad \text{et} \quad \left|f_P^{i+1} - 1\right| \leq \epsilon , \tag{D.73}$$

où le critère de convergence est par exemple fixé à $\epsilon = 10^{-10}$. On rappelle que les termes f_T^{i+1} et f_P^{i+1} sont définis par les relations (D.39) et (D.40). A la convergence, l'algorithme est stoppé et les valeurs T^{i+1} et P^{i+1} sont affectées à

T^{n+1} et P^{n+1}. Les valeurs successives de $f_T^{i+1}-1$ et $f_P^{i+1}-1$ sont reportées dans les Tableau D.4 et Tableau D.5, tandis que les valeurs successives de T^i et P^i sont tracées sur les Figure D.8 et Figure D.9. Pour le cas ***LOx-H₂*** comme pour le cas ***LOx-H₂O***, 4 itérations sont nécessaires pour atteindre la convergence avec le critère précédemment défini. On constate cependant que la première itération fournit déjà une très bonne approximation des valeurs finales.

Itération i	0	1	2	3
$f_T^{i+1}-1$	$-1.02\cdot10^{-1}$	$3.36\cdot10^{-6}$	$-1.04\cdot10^{-13}$	$-1.11\cdot10^{-16}$
$f_P^{i+1}-1$	$-1.01\cdot10^{-1}$	$-5.62\cdot10^{-5}$	$-1.96\cdot10^{-10}$	$2.22\cdot10^{-16}$

TABLEAU D.4 – ***Convergence de l'algorithme de Newton, cas LOx-H₂***

Itération i	0	1	2	3
$f_T^{i+1}-1$	$-4.58\cdot10^{-1}$	$3.83\cdot10^{-4}$	$-1.28\cdot10^{-9}$	≈ 0
$f_P^{i+1}-1$	$-4.54\cdot10^{-1}$	$-2.91\cdot10^{-3}$	$-1.22\cdot10^{-6}$	$8.66\cdot10^{-15}$

TABLEAU D.5 – ***Convergence de l'algorithme de Newton, cas LOx-H₂O***

D.2.3.3 Influence des grandeurs physiques sur les valeurs convergées

Les termes adimensionnés f_T^∞ et f_P^∞, définis en (D.41) et (D.42) comme les rapports des valeurs convergées sur les valeurs initiales, sont utilisés ici pour évaluer l'influence des grandeurs physiques sur la survenue et l'amplitude de la variation de pression. L'objectif est notamment de déterminer s'il est possible de jouer sur la valeur de certains de ces paramètres physiques (dilatabilité, compressibilité...) afin d'annihiler ou tout du moins réduire cette variation de pression.

Pour cela, nous allons tracer les valeurs prises par f_T^∞ et f_P^∞ en faisant varier successivement certains des paramètres physiques de l'espèce A ou de l'espèce B. La Figure D.10 représente par exemple, pour les cas ***LOx-H₂*** et ***LOx-H₂O***, l'évolution des valeurs convergées f_T^∞ et f_P^∞ lorsque T_A varie, tous les autres paramètres définis dans les Tableau D.1 à Tableau D.3 étant gardés constants. Il en est de même pour les Figure D.11, Figure D.12 et Figure D.13, le paramètre variable étant successivement P_0, α_0, et β_0. Dans le cadre des données définies pour les cas ***LOx-H₂*** et ***LOx-H₂O***, les observations suivantes peuvent alors être faites quant à l'influence des différents paramètres physiques :

- Un certain nombre de termes sont négligeables dans l'expression § D.2.3.1 de f_T^{i+1}. Ajouté au fait que la première sous-itération de l'algorithme fournit déjà une valeur proche de la valeur convergée, il s'ensuit que la valeur convergée f_T^∞ est très bien approchée par l'expression

$$f_T^{\sim} = 1 - \frac{T_A - T_B}{T_A}\frac{c_{p,B}}{c_{v,A}+c_{p,B}} \approx f_T^\infty \,, \tag{D.74}$$

  qui n'est autre qu'une forme simplifiée de f_T^1, dans laquelle un certain nombre de termes ont été négligés. Cela se vérifie sur la Figure D.10 où les valeurs de $f_T^{\sim}$ en fonction de T_A sont tracées en même temps que celles de f_T^∞.

- L'influence de la pression initiale P_0 et des coefficients thermoélastiques α_0 et β_0 sur les valeurs convergées f_T^∞ et f_P^∞ ne devient non négligeable qu'à partir de valeurs bien supérieures à celles rencontrées dans la réalité.

- Les valeurs prises par f_P^∞ se confondent quasiment parfaitement avec celles de f_T^∞. Cette observation permet d'appréhender assez simplement la problématique des oscillations de pression dans une simulation numérique de type gaz-liquide avec CEDRE. En effet, pour un mélange d'espèces de type "gaz parfait" et "liquide compressible" donné, l'amplitude des oscillations de pression est directement et quasiment uniquement reliée à l'intensité des gradients de température. Cette conclusion va déterminer la stratégie retenue pour limiter la survenue de ces oscillations de pression dans nos simulations avec CEDRE (voir § D.3).

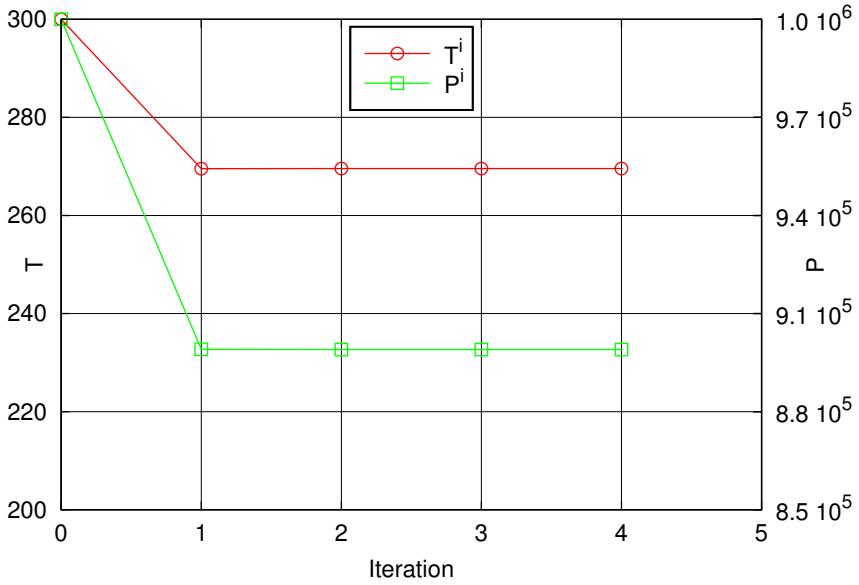


FIGURE D.8 – *Itérations successives de l'algorithme de Newton pour le cas LOx-H2.*

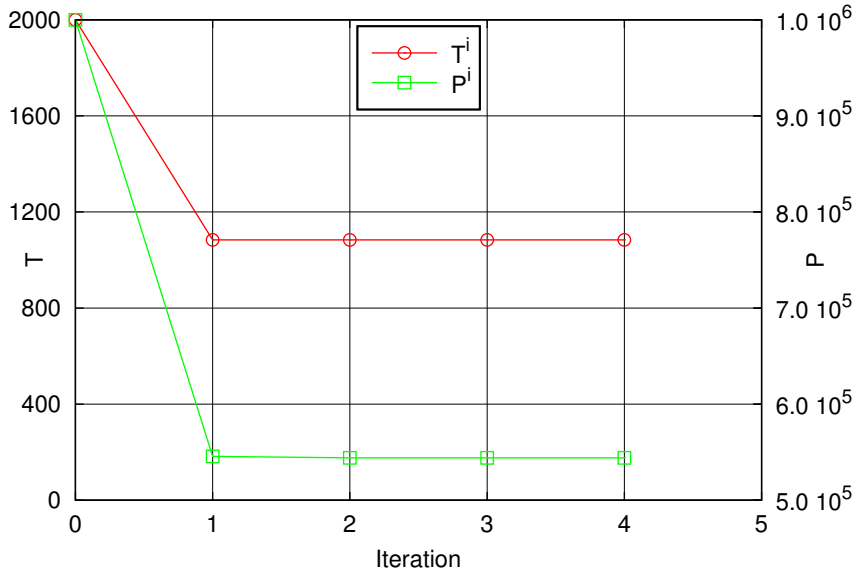


FIGURE D.9 – *Itérations successives de l'algorithme de Newton pour le cas LOx-H2O.*

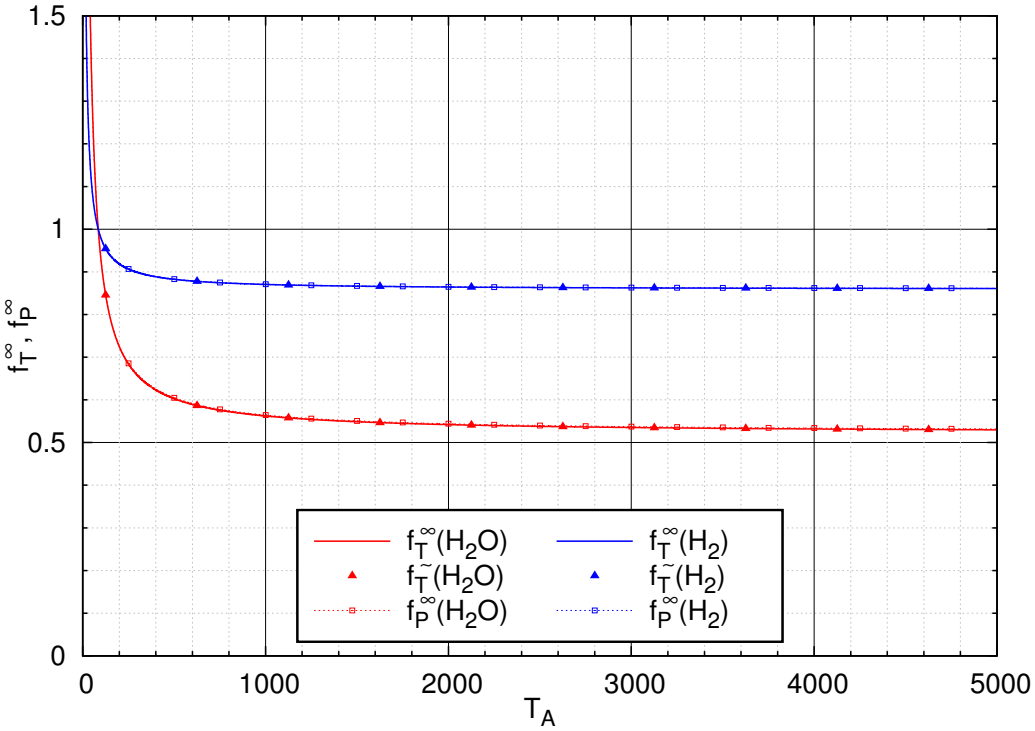


FIGURE D.10 – ***Valeurs convergées des fonctions f_T et f_P en fonction de T_A.***

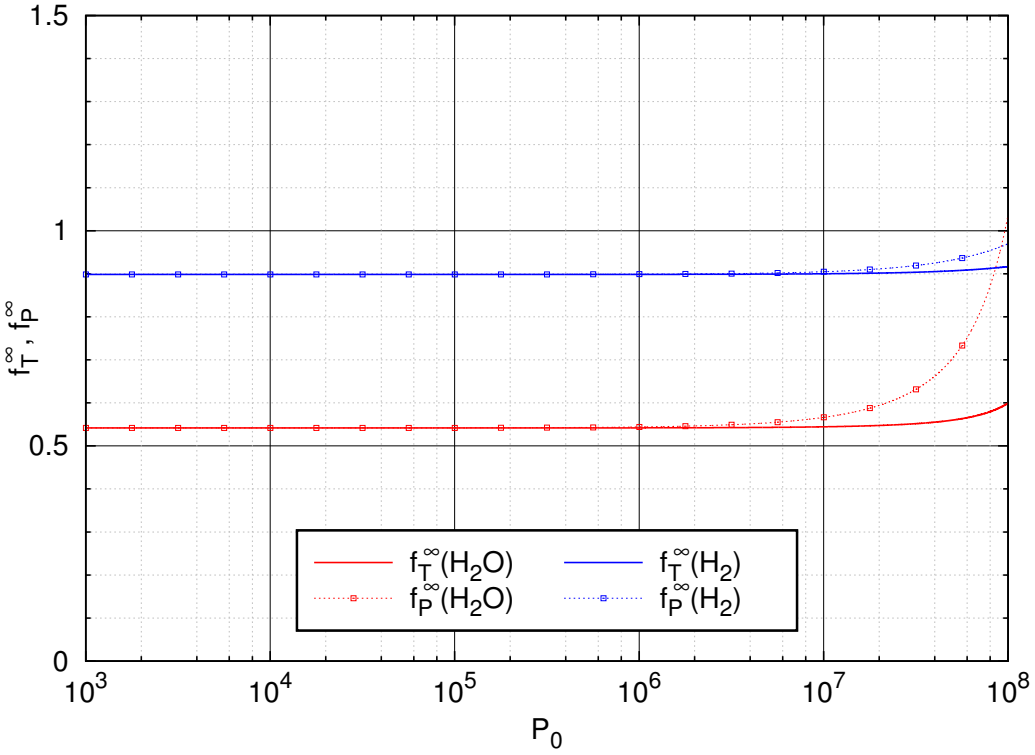


FIGURE D.11 – ***Valeurs convergées des fonctions f_T et f_P en fonction de P_0.***

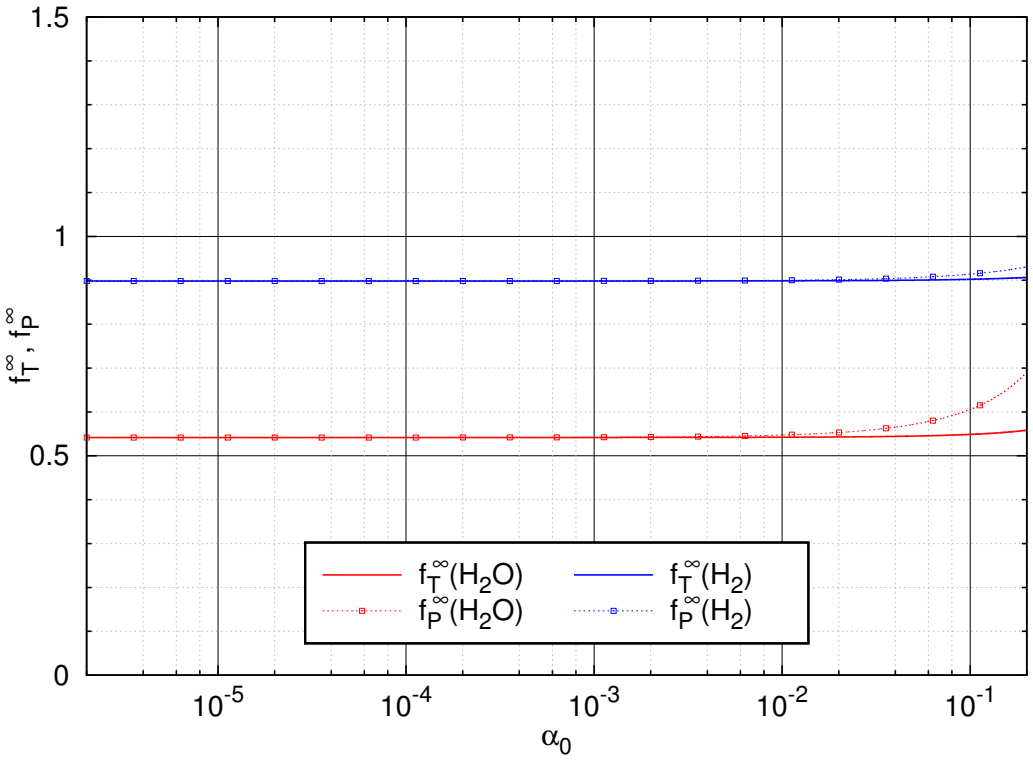


FIGURE D.12 – ***Valeurs convergées des fonctions f_T et f_P en fonction de α_0.***

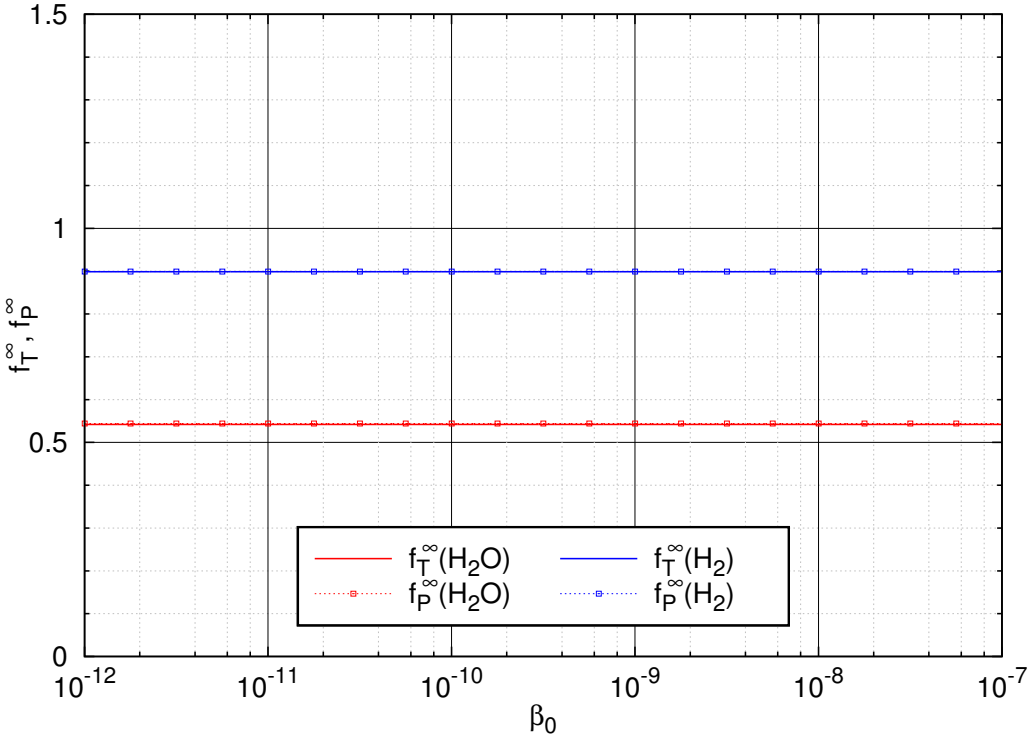


FIGURE D.13 – ***Valeurs convergées des fonctions f_T et f_P en fonction de β_0.***

D.3 Conséquences sur la description thermodynamique de l'oxygène liquide

Nous venons d'analyser en détail sous quelles conditions et dans quelles proportions la modélisation en fluide homogène (ou "4 équations") était susceptible de générer des oscillations de pression non physiques. Il s'agit maintenant d'en déduire une stratégie simple à adopter pour limiter ces oscillations dans le cadre des simulations numériques diphasiques que nous visons avec CEDRE. Si l'on se réfère aux différentes solutions qui existent dans la littérature, présentées au début de cette annexe, nous pouvons faire les remarques suivantes :

- Les méthodes impliquant une quelconque reconstruction ou suivi de l'interface sortent totalement du cadre de cette étude. On se restreint ainsi aux méthodes qui restent dans le cadre du formalisme "interfaces diffuses" de CEDRE.
- Le développement d'un solveur purement multifluide de type "7 équations", basé sur les travaux de SAUREL et ABGRALL [237] est en cours de développement dans CEDRE, mais néanmoins à un stade trop précoce pour pouvoir être utilisé dans la présente étude (cf. Chapitre 4). Aussi, on s'attache à trouver des solutions restant dans le cadre du formalisme du solveur CHARME, dit à "4 équations" ou encore "à fluide homogène".
- Parmi ces solutions, celles qui impliquent l'ajout d'une équation de transport supplémentaire (sur la fonction $1/(\gamma-1)$ par exemple) n'ont pas été retenues dans la présente étude, pour plusieurs raisons. En premier lieu, ils semblent qu'elles créent d'autres problèmes que ceux qu'elles résolvent (SAUREL et LEMETAYER [239], JOHNSEN et HAM [152]). Elles manquent également d'une certaine généralité, et sont donc incompatibles en l'état avec le formalisme générique de la bibliothèque de thermodynamique utilisée dans CEDRE. Ce type de solution pourrait néanmoins être étudié dans un futur proche.
- De même, les solutions qui n'impliquent pas d'équation supplémentaire mais nécessitent de coder des flux non conservatifs (méthodes "double flux") n'ont pas été retenues, pour les mêmes raisons.
- Finalement, nous allons adopter une approche différente, spécifiquement adaptée à l'application visée. Celle approche reprend l'idée développée dans la thèse de MEYERS [194], que nous résumons brièvement ci-dessous.

Dans sa thèse, MEYERS [194] s'intéresse également à la simulation numérique des écoulements diphasiques en combustion cryotechnique, par le biais d'une approche à fluide homogène. Sa stratégie quant à la description thermodynamique du fluide est la suivante. Il commence par faire l'hypothèse que l'oxygène liquide peut être considéré comme isotherme. Cette hypothèse se justifie au regard des différents temps caractéristiques mis en jeu. Il s'avère en effet que sous les conditions de fonctionnement typiques qui nous intéressent (pression de chambre à 10 bar, et température d'injection à 85 K), le temps de chauffage des gouttes d'oxygène liquide jusqu'à leur température de saturation (environ 120 K sous une pression de 10 bar) est très largement inférieur à leur temps d'évaporation (cf. Annexe E).

Il suppose donc que l'oxygène liquide peut être décrit tout au long de son cycle de vie par une température constante, égale à la température de saturation sous la pression moyenne de la chambre. L'énergie interne du liquide peut alors également être considérée constante, une fois négligée la contribution de la pression étant donnée la faible compressibilité du liquide. En conséquence, il remplace l'équation bilan sur l'énergie du fluide par une équation bilan portant uniquement sur l'énergie des espèces gazeuses. Par ailleurs, la loi d'état pour l'oxygène liquide est celle d'un liquide compressible mais non dilatable, du type $\rho = \rho(P)$. En l'occurrence, il s'agit exactement de la loi d'état écrite en (5.124), dans laquelle le coefficient de dilatation isobare α_0 est nul. Enfin, il suppose l'égalité des pressions entre les phases dans les mailles de mélange, ce qui revient à négliger l'influence de la tension de surface.

La procédure de fermeture thermodynamique utilisée se distingue alors en fonction des phases en présence dans un volume de contrôle. Si la phase gazeuse est pure, il s'agit de la procédure classique pour un mélange d'espèces de type gaz parfait. La température de la phase gazeuse est recalculée à partir de l'énergie interne actualisée du mélange gazeux, puis la pression est obtenue en utilisant la loi d'état. Si la phase liquide est pure, alors la pression est recalculée à partir de la masse volumique actualisée en utilisant la loi d'état purement compressible $\rho = \rho(P)$. Quant à la température, elle reste évidemment la température uniforme initialement définie. Enfin, dans le cas d'une maille de mélange, il existe une unique fraction volumique de phase puisque les deux phases sont supposées en équilibre de pression. La procédure consiste alors à recalculer dans un premier temps la température du mélange gazeux seul, à partir de la valeur donnée par l'équation de transport de l'énergie du gaz. Une fois cette température connue, la fraction volumique d'équilibre peut être calculée, ainsi que la pression d'équilibre.

Cette manière de procéder permet manifestement d'empêcher la survenue d'oscillations de pression du type de celles décrites dans cette annexe. Malheureusement, nos tentatives pour reproduire cette stratégie dans le cadre du formalisme actuel de CEDRE ont échoué. En effet, l'étape de la procédure qui consiste à recalculer la température

de la phase gazeuse seule dans les mailles de mélange s'est révélée instable. Dans les cas où la présence du gaz est infime, on aboutit à un calcul du type "ϵ/ϵ" où ϵ tend vers 0, ce qui fait diverger la température du gaz, et ensuite la pression. Des tentatives pour imposer des seuils minimaux sur la présence du gaz n'ont pas été concluantes, aussi nous avons opté pour une stratégie légèrement différente.

Stratégie retenue pour la description thermodynamique de l'oxygène liquide

Conformément à l'analyse faite par MEYERS [194] à propos des différents temps caractéristiques, nous allons également considérer l'oxygène liquide comme isotherme dans sa description dense au sein du solveur du fluide. Cela se justifie bien dans la mesure où le temps caractéristique du processus d'atomisation primaire est rapide devant le temps de chauffage du cœur liquide dense. En d'autres termes, l'atomisation primaire et donc le transfert de l'oxygène liquide depuis le solveur "fluide" vers le solveur "phase dispersée" sont supposés se produire avant que le cœur liquide n'ait le temps de s'échauffer. Dans la réalité, les mécanismes sont évidemment plus complexes que cela. Les transferts thermiques ne sont pas négligeables à l'interface entre l'oxygène liquide et la phase gazeuse, si bien qu'il existe probablement du transfert de masse par évaporation en zone dense, antérieurement ou simultanément au processus d'atomisation primaire. Néanmoins, ce transfert de masse est semble-t-il négligeable devant le transfert de masse résultant de l'évaporation du spray. En tout état de cause, ce mécanisme n'est pas pris en compte dans cette étude. La stratégie à mettre en place doit répondre aux deux problèmes suivants :

(i) La loi d'état de liquide compressible - dilatable disponible dans la bibliothèque de thermodynamique de CEDRE (cf. § 5.5.4) n'est pas bien adaptée aux fortes disparités de température rencontrées en combustion cryotechnique. En effet, comme nous l'avons vu en § 5.5.4, le formalisme de "fluide homogène" implique une mise à l'équilibre immédiate de la température lorsque des espèces du fluide sont mélangées. Ainsi, de l'oxygène liquide initialement à une température de l'ordre de la centaine de kelvins peut se retrouver mélangé à du gaz à une température de l'ordre du millier de kelvins en raison de la diffusion numérique. Ce faisant, la température intermédiaire générée par le processus d'homogénéisation se retrouve très éloignée de la température de référence de la loi d'état de l'oxygène liquide, voire même en dehors de ses bornes de validité (voire la Figure 5.3).

En réalité, le problème réside de manière plus générale dans le fait d'évaluer des propriétés physiques pour l'oxygène liquide à une température très différente de sa température de référence, et même de sa température "d'existence". Outre la loi d'état, il en est ainsi de même pour toutes les propriétés qui sont modélisées par un polynôme de la température : chaleur spécifique à pression constante, propriétés de transport (viscosité, conductivité thermique).

(ii) Des oscillations de pression purement numériques sont générées à l'interface entre des milieux de compressibilité différente lorsque leur température est différente. Dans le cas d'un liquide et d'un gaz, nous avons vu en § D.2.3 que l'amplitude relative de ces oscillations est quasiment égale à l'amplitude relative de la variation de température.

La stratégie que nous adoptons en réponse à ces deux problèmes est la suivante :

(i) Pour éviter les problèmes liés à l'évaluation de certaines propriétés physiques à des températures trop éloignées de la température de référence, la solution la plus simple consiste à supprimer la dépendance en température dans l'expression de ces grandeurs physiques. Ceci ne pose pas de problème puisqu'on a justifié l'hypothèse consistant à considérer l'oxygène liquide comme isotherme. Les propriétés qui sont habituellement décrites par un polynôme fonction de la température deviennent des constantes. En particulier, la chaleur spécifique à pression constante de l'oxygène liquide sera prise constante, et notée $c_{p,0}$. De même pour la viscosité et le conductivité thermique, notées μ_0 et λ_0. En ce qui concerne la loi d'état pour l'oxygène liquide décrite en § 5.5.4, on supprime la dépendance en température en rendant le liquide indilatable, c'est-à-dire en définissant un coefficient de dilatation isobare nul. C'est l'hypothèse qui avait été faite dans la thèse de MEYERS [194], et c'est donc également l'hypothèse que nous faisons ici. Il faut noter que ceci n'est pas totalement équivalent à imposer le caractère isotherme de l'oxygène liquide [5]. En effet, le coefficient de dilatation isobare intervient dans le calcul de la vitesse du son (voir ci-dessous).

(ii) Puisque les oscillations de pression sont proportionnelles aux gradients de température, une manière de les limiter consiste à limiter les gradients de température. Si T_l désigne la température constante que l'on choisit pour caractériser l'oxygène liquide au sein du solveur "fluide", alors nous allons définir T_l à une valeur différente de la température réelle d'injection de l'oxygène liquide, que l'on note par exemple T_{inj} et dont la valeur est $T_{inj} = 85$ K dans Mascotte. En l'occurrence, on définit la valeur $T_l = 280$ K qui correspond à la température d'initialisation du gaz dans la chambre, ainsi qu'à la température d'injection de l'hydrogène. De cette manière, on lisse au maximum les gradients qui pourraient exister. Bien sur, des gradients de température

5. Stratégie qui consisterait à évaluer les lois d'état du paragraphe § 5.5.4 en imposant $T = T_0$.

vont apparaitre lorsque la combustion va s'initier, mais ils seront toutefois beaucoup moins forts et étalés sur plusieurs mailles. On limite ainsi fortement l'amplitude des oscillations de pression générées, en tout cas suffisamment pour ne pas compromettre le bon déroulement des simulations. Par ailleurs, le fait que la température d'injection soit erronée n'a pas d'impact, puisque toutes les propriétés physiques de l'oxygène liquide ont été rendues indépendantes de la température. De plus, lorsque l'oxygène liquide est transféré du solveur "fluide" CHARME vers le solveur "phase dispersée" SPIREE, la température des gouttes créées est réinitialisée à une température correcte, notée T_{ato} (cf. Chapitre 10).

En revanche, il convient de garder une cohérence en ce qui concerne l'énergie injectée dans la simulation par le biais de l'oxygène liquide. En effet, les solveurs CHARME et SPIREE utilisent la même température de référence T_0 pour définir l'enthalpie. En l'occurrence, il s'agit de la température réelle d'injection de l'oxygène liquide, à savoir $T_0 = T_{inj} = 85\text{K}$ [6]. Par conséquent, si l'on veut que l'enthalpie injectée dans SPIREE au moment du transfert depuis CHARME corresponde à l'enthalpie injectée initialement via l'oxygène liquide dans CHARME, il est nécessaire de corriger l'enthalpie de référence utilisée dans CHARME par rapport à celle utilisée dans SPIREE. Si l'on note $h_{0,SP}$ l'enthalpie de référence définie dans SPIREE, alors l'enthalpie de référence $h_{0,CH}$ à utiliser dans CHARME s'obtient par la relation

$$h_{0,CH} = h_{0,SP} - c_{p,0}(T_l - T_0)\,. \tag{D.75}$$

Notons enfin que les propriétés physiques rendues indépendantes de la température, à savoir $c_{p,0}$, μ_0 et λ_0, sont bien sûr calculées à la température réelle d'injection $T_{inj} = T_0$, et non pas à la température "virtuelle" T_l.

Pour terminer, réécrivons les relations thermodynamiques utiles introduites en § 5.5.4, en tenant compte des hypothèses faites précédemment sur l'oxygène liquide. Puisque le liquide est considéré indilatable, et donc que $\alpha_0 = 0$, la loi d'état (5.124) se réduit à

$$\rho = \rho_0\Big[1 + \beta_0\,(P - P_0)\Big]\,. \tag{D.76}$$

La relation de Mayer (5.100) implique également l'égalité des chaleurs massiques, et donc un rapport γ égal à l'unité :

$$c_{p,0} = c_{v,0}\,, \quad \gamma = 1\,. \tag{D.77}$$

La relation énergétique (5.134) se réécrit dans ces conditions :

$$e(T,P) = h_0 + c_{p,0}\,(T - T_0) + \frac{\ln\Big[1 + \beta_0(P - P_0)\Big]}{\beta_0\rho_0} - \frac{P}{\rho}\,. \tag{D.78}$$

De plus, $e_0 = h_0 - P_0/\rho_0$, et il s'avère que $\beta_0(P - P_0) \ll 1$ pour une très large plage de pression. Aussi il est possible de réécrire l'expression de l'énergie interne du liquide sous la forme :

$$e(T,P) \approx e_0 + c_{v,0}\,(T - T_0) + P\left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho}\right)\,. \tag{D.79}$$

L'enthalpie s'exprime également comme

$$h(T,P) \approx h_0 + c_{v,0}\,(T - T_0) + \frac{P - P_0}{\rho_0}\,. \tag{D.80}$$

Il apparait que les derniers termes de ces relations sont généralement inférieurs de plusieurs ordres de grandeur aux valeurs de référence, si bien que l'énergie interne et l'enthalpie du liquide ne dépendent finalement quasiment que de la température :

$$e(T) \approx e_0 + c_{v,0}\,(T - T_0)\,, \tag{D.81}$$

$$h(T) \approx h_0 + c_{v,0}\,(T - T_0)\,. \tag{D.82}$$

Il faut noter que le caractère isotherme de l'oxygène liquide n'est pas forcé au niveau du calcul de l'énergie interne. La température "vue" par l'oxygène liquide au cours de l'exécution de l'algorithme de Newton est bien la température courante T en cours de convergence, et non pas la température T_l. Dans le cas d'un volume de contrôle où l'oxygène liquide est pur, la température courante est évidemment $T = T_l$. En revanche, dans le cas des mailles de mélange, la température courante T est a priori différente de T_l. Par ailleurs, d'après la relation (5.142), la vitesse du son est alors une constante d'expression

$$c = c_0 = \frac{1}{\sqrt{\beta_0\rho_0}}\,. \tag{D.83}$$

6. Il s'agit également de la température d'initialisation des gouttes dans SPIREE au moment du transfert par atomisation primaire. On a donc $T_{ato} = T_{inj} = T_0 = 85$ K (cf. Chapitre 10).

Cette formulation est malheureusement erronée, puisqu'elle ne prend pas en compte la dilatabilité du liquide. La formule (5.142) indique que la vitesse du son, même évaluée à la température de référence de la loi d'état T_0, est normalement donnée par

$$c(T_0) = \frac{1}{\sqrt{\beta_0 \rho_0 - \alpha_0^2 T_0 / c_p}} \,. \tag{D.84}$$

Le coefficient de dilatation isobare de l'oxygène liquide à $T_0 = 85$ K et $P_0 = 10$ bar vaut $\alpha_0 \approx 4 \cdot 10^{-3}$ K^{-1}, et la chaleur spécifique à pression constante vaut $c_{p,0} \approx 1684$ J/(kg.K). Le coefficient de compressibilité isotherme vaut $\beta_0 \approx 1,7 \cdot 10^{-9}$ Pa^{-1}, et la masse volumique de référence est $\rho_0 \approx 1168$ kg/m^3. La vitesse du son calculée par l'expression (D.84) est donc

$$c \approx 936 \text{ m/s} \,, \tag{D.85}$$

tandis que la vitesse du son calculée par l'expression (D.83) ne prenant pas en compte la dilatabilité vaut

$$c \approx 710 \text{ m/s} \,. \tag{D.86}$$

La vitesse du son donnée par une base de données thermodynamiques pour ces conditions de pression et température est

$$c \approx 951 \text{ m/s} \,. \tag{D.87}$$

Il y a donc une erreur d'environ 25% sur la vitesse du son lorsque l'on fait l'hypothèse que l'oxygène liquide est indilatable. Cela ne porte pas à conséquence ***tant que l'on ne s'intéresse pas spécifiquement à l'acoustique de la phase liquide***.

Annexe E

Étude de la robustesse des modèles d'évaporation de gouttes

E.1 Introduction

Cette annexe traite de la modélisation disponible au sein du solveur SPIREE du code CEDRE, afin de simuler l'évaporation de particules liquides dans un milieu gazeux potentiellement multi-espèces. Plus particulièrement, après avoir rappelé brièvement l'établissement des différents modèles et les hypothèses sous-jacentes (synthèse du rapport technique Ruiz [233]), il s'agit de rendre compte des difficultés de robustesse liées à l'utilisation de ces modèles, de préciser leur origine, et de proposer un traitement adéquat pour les résoudre. Nous verrons que les difficultés de robustesse sont d'origine double.

En premier lieu, le modèle général d'évaporation qui décrit de manière simultanée le chauffage et l'évaporation des gouttes (Abramzon et Sirignano [5]), devient instable dans des configurations d'ébullition de gouttes. En d'autres termes, lorsque les gouttes atteignent leur température de saturation, le modèle échoue à annuler strictement le flux de chauffage des gouttes. Celui-ci étant fortement couplé avec le débit d'évaporation, des oscillations apparaissent et s'amplifient ensuite fortement. Ce comportement est rencontré dans des configurations particulières, lorsque des gouttes sont chauffées très rapidement à la saturation sans s'être vaporisées complètement. C'est typiquement le cas des configurations de propulsion liquide. Le point de fonctionnement A-10 du banc Mascotte, par exemple, implique la présence de gouttes d'oxygène liquide initialement à environ 80 K, situées dans un environnement gazeux sous une pression de 10 bar et une température de plus de 1000 K. Ces gouttes sont ainsi très vite chauffées jusqu'à leur température de saturation, qui n'est que d'environ 120 K à cette pression, et la quasi-totalité de leur évaporation se fait en régime d'ébullition. Jusqu'à maintenant, la simulation numérique de ce type de configuration avec les modèles inclus dans SPIREE présentait inévitablement les instabilités évoquées. Cette problématique est inhérente au modèle d'évaporation en lui-même. Elle n'est pas corrélée à la forme des équations du spray (approche multi-classes ou sectionnelle). Le problème peut également être étudié indépendamment de la résolution temporelle (schémas explicites ou implicites, d'ordre 1 ou 2, méthode de splitting d'opérateurs ou intégration simultanée des flux et des termes sources).

La seconde origine des problèmes de robustesse réside dans le traitement de la fin de l'évaporation, c'est-à-dire le traitement de la disparition des gouttes. Ce problème est lui davantage relié à la forme des équations du spray. Notamment, le traitement de la fin d'évaporation est différent selon que l'on utilise une approche multi-classes ou une approche sectionnelle. Cet aspect sera traité ici uniquement dans une approche multi-classes, où chaque classe est constituée de gouttes ayant toutes un même et unique diamètre, et dans le cadre d'un cycle en temps "traditionnel", c'est-à-dire sans séparation des opérateurs de flux et de sources.

E.2 Établissement du modèle général d'évaporation

E.2.1 Équations locales

Afin de décrire les transferts de masse et de chaleur au cours du processus d'évaporation, nous considérons classiquement une goutte isolée dans un mélange gazeux constitué de n_{esp} espèces. La goutte est constituée d'une seule des n_{esp} espèces, notée A, et est en équilibre dynamique avec le gaz. Les propriétés du mélange gazeux sont

supposées figées à l'infini (loin de la goutte). On effectue alors des bilans de masse pour chacune des espèces, ainsi que pour l'enthalpie du mélange gazeux.

En utilisant la loi de Fick pour exprimer la diffusion moléculaire, l'équation de conservation d'une espèce i, $(1 \leq i \leq n_{esp})$ s'écrit

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho Y_i \boldsymbol{v} - \rho \mathcal{D}_i \nabla Y_i\right) = 0 \,, \tag{E.1}$$

où ρ représente la masse volumique du mélange gazeux, Y_i la fraction massique de l'espèce i, $\boldsymbol{v}$ la vitesse du mélange, et $\mathcal{D}_i$ le coefficient de diffusion de l'espèce i. En définissant l'enthalpie de référence h_i^0 pour l'espèce i à la température de référence T^0, l'enthalpie du mélange à la température T s'obtient par

$$h(T) = \sum_{i=1}^{n_{esp}} Y_i h_i(T) = \sum_{i=1}^{n_{esp}} Y_i \Big(h_i^0 + \int_{T^0}^{T} c_{p,i}\, dT\Big) \,. \tag{E.2}$$

Le bilan d'enthalpie s'écrit

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \boldsymbol{v} h\right) = -\nabla \cdot \boldsymbol{q} + \tau : \nabla \boldsymbol{v} + \frac{dP}{dt} \,, \tag{E.3}$$

avec P la pression et $\boldsymbol{q}$ le flux de chaleur donné par

$$\boldsymbol{q} = -\lambda \nabla T - \sum_{i=1}^{n_{esp}} \rho \mathcal{D}_i h_i \nabla Y_i \,. \tag{E.4}$$

De plus, τ est le tenseur des contraintes visqueuses et $\tau : \nabla \boldsymbol{v}$ représente la puissance dissipée par les forces de frottement visqueux. Dans les modèles classiques de transfert de masse pour les gouttes, les hypothèses suivantes sont faites :

- l'évaporation de la goutte est supposée suffisamment lente pour pouvoir utiliser une hypothèse de ***quasi-stationnarité***. Les termes d'évolution temporelle sont donc négligés.
- la ***dissipation visqueuse est négligée***.
- le phénomène est supposé isobare.

Sous ces hypothèses, les équations de bilan précédentes se réécrivent :

$$\nabla \cdot \left(\rho Y_i \boldsymbol{v} - \rho \mathcal{D}_i \nabla Y_i\right) = 0 \,, \tag{E.5}$$

$$\nabla \cdot \left(\rho \boldsymbol{v} h - \lambda \nabla T - \sum_{i=1}^{n_{esp}} \rho \mathcal{D}_i h_i \nabla Y_i \,.\right) = 0 \tag{E.6}$$

Enfin, on fait l'hypothèse que le problème est à ***symétrie sphérique***, et que la vitesse du transfert de masse est purement radiale, constante, et s'écrit v. De plus, la conduction thermique est supposée ici infinie ***au sein de la goutte***. En conséquence, la température de la goutte sera toujours considérée uniforme et égale à la température en surface. Les équations précédentes s'écrivent alors, en coordonnées sphériques :

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(\rho v r^2 Y_i - \rho \mathcal{D}_i r^2 \frac{dY_i}{dr}\right) = 0 \,, \tag{E.7}$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(\rho v r^2 h - \lambda r^2 \frac{dT}{dr} - r^2 \left[\sum_{i=1}^{n_{esp}} \rho \mathcal{D}_i h_i \frac{dY_i}{dr}\right]\right) = 0 \,. \tag{E.8}$$

Dans la suite, nous allons voir comment l'intégration de ces deux relations permet d'exprimer le débit d'évaporation et le flux de chauffage à la surface de la goutte.

E.2.2 Définition et résolution d'une équation type

Dans un premier temps, comme dans le rapport RUIZ [233], considérons l'équation type suivante :

$$\frac{d}{dr}\left[\alpha(r) - \frac{\beta(r)}{\dot{m}} \frac{d\alpha(r)}{dr}\right] = 0 \,. \tag{E.9}$$

A ce stade, $\alpha(r)$ et $\beta(r)$ sont des fonctions qui restent à définir, et $\dot{m}$ est une constante. Nous verrons ensuite que les relations (E.7) et (E.8) obtenues précédemment peuvent se mettre sous cette forme, et que $\dot{m}$ représente alors le

débit massique. Concentrons-nous pour l'instant sur la résolution mathématique de l'équation type. Pour cela, on introduit une fonction $\xi(r)$ telle que

$$\frac{d\xi(r)}{dr} = -\frac{\dot{m}}{\beta(r)}\,, \tag{E.10}$$

et

$$\xi(r) = \dot{m}\int_r^{+\infty} \frac{1}{\beta(r)}\,dr\,. \tag{E.11}$$

Avec ce changement de variable, l'équation type devient

$$\frac{d}{dr}\left[\alpha + \frac{d\alpha}{d\xi}\right] = 0\,. \tag{E.12}$$

Ainsi, le terme $\alpha + \dfrac{d\alpha}{d\xi}$ est une constante, que l'on peut définir à partir des valeurs prises à la surface de la goutte, en $r = r_s$:

$$\alpha + \frac{d\alpha}{d\xi} = \text{cste} = \alpha_s + \left(\frac{d\alpha}{d\xi}\right)_{r_s}\,. \tag{E.13}$$

La résolution de cette équation différentielle linéaire conduit à

$$\alpha = \alpha_s + \left(\frac{d\alpha}{d\xi}\right)_{r_s} + K\exp(-\xi)\,. \tag{E.14}$$

Une première condition limite en l'infini donne

$$\alpha_\infty = \alpha_s + \left(\frac{d\alpha}{d\xi}\right)_{r_s} + K \qquad \Longrightarrow \qquad K = \alpha_\infty - \alpha_s - \left(\frac{d\alpha}{d\xi}\right)_{r_s}\,, \tag{E.15}$$

puisque $\xi = 0$ en l'infini d'après la relation (E.11). Une seconde condition limite exprimée à la surface de la goutte permet d'écrire

$$\alpha_s = \alpha_s + \left(\frac{d\alpha}{d\xi}\right)_{r_s} + K\exp(-\xi_s) \qquad \Longrightarrow \qquad \left(\frac{d\alpha}{d\xi}\right)_{r_s} = -K\exp(-\xi_s)\,. \tag{E.16}$$

Puis, en introduisant l'expression de la constante K, il vient :

$$\exp(\xi_s) = \frac{\alpha_\infty - \alpha_s - \left(\dfrac{d\alpha}{d\xi}\right)_{r_s}}{-\left(\dfrac{d\alpha}{d\xi}\right)_{r_s}} = 1 + \frac{\alpha_\infty - \alpha_s}{-\left(\dfrac{d\alpha}{d\xi}\right)_{r_s}}\,. \tag{E.17}$$

Or, d'après la relation (E.10), on a

$$-\frac{d\alpha}{d\xi} = -\frac{d\alpha}{dr}\frac{dr}{d\xi} = \frac{d\alpha}{dr}\frac{\beta(r)}{\dot{m}}\,. \tag{E.18}$$

Ainsi :

$$\xi_s = \ln\left[1 + \frac{\alpha_\infty - \alpha_s}{\left(\dfrac{d\alpha}{dr}\right)_{r_s}\dfrac{\beta(r_s)}{\dot{m}}}\right]\,. \tag{E.19}$$

L'expression (E.11) permet d'exprimer le débit massique $\dot{m}$ en fonction du terme ξ_s :

$$\dot{m} = \frac{\xi_s}{\displaystyle\int_{r_s}^{+\infty} \frac{1}{\beta(r)}\,dr}\,. \tag{E.20}$$

Soit finalement :

$$\boxed{\dot{m} = \frac{1}{\displaystyle\int_{r_s}^{+\infty} \frac{1}{\beta(r)}\,dr}\ln\left[1 + \frac{\alpha_\infty - \alpha_s}{\left(\dfrac{d\alpha}{dr}\right)_{r_s}\dfrac{\beta(r_s)}{\dot{m}}}\right]\,.} \tag{E.21}$$

Dans les paragraphes suivants, nous allons appliquer ce résultat aux équations (E.7) et (E.8), liées respectivement aux transferts de masse et de chaleur.

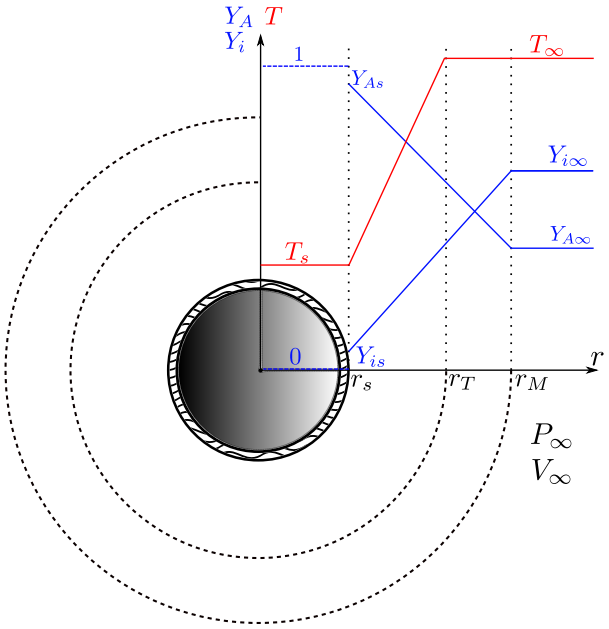


FIGURE E.1 – ***Goutte évaporante dans un mélange gazeux figé à l'infini. Représentation des films thermiques et massiques.***

E.2.3 Intégration de l'équation liée au transfert de masse (E.7)

L'équation (E.7) se réécrit :

$$\frac{d}{dr}\left(\rho v r^2 Y_i - \rho \mathcal{D}_i r^2 \frac{dY_i}{dr}\right) = 0\,. \tag{E.22}$$

Or, le débit massique se conserve dans la direction radiale, et on a donc

$$\dot{m} = 4\pi r_s^2 \rho v = 4\pi \rho v r^2 = \text{cste}\,. \tag{E.23}$$

Ainsi l'équation (E.22) devient

$$\frac{d}{dr}\left(Y_i - \frac{4\pi r^2 \rho \mathcal{D}_i}{\dot{m}} \frac{dY_i}{dr}\right) = 0\,, \tag{E.24}$$

et nous retrouvons l'équation type (E.9), avec

$$\alpha(r) = Y_i(r) \qquad \beta(r) = 4\pi r^2 \rho \mathcal{D}_i\,. \tag{E.25}$$

On montre ensuite (cf. RUIZ [233]) que le terme $\left(\frac{d\alpha}{dr}\right)_{r_s} \frac{\beta(r_s)}{\dot{m}}$ présent dans l'équation (E.21) se réécrit ici :

$$\frac{\beta(r_s)}{\dot{m}}\left(\frac{d\alpha}{dr}\right)_{r_s} = Y_{is} - \delta_{i,A}\,. \tag{E.26}$$

Le symbole de Kronecker $\delta_{i,A}$ vaut 1 si l'espèce i est l'espèce évaporante A constituant la goutte, et vaut 0 sinon. La Figure E.1 illustre les différentes notations utilisées. D'après l'équation (E.21), l'expression suivante est alors obtenue pour le débit massique :

$$\dot{m} = \frac{1}{\displaystyle\int_{r_s}^{+\infty} \frac{1}{4\pi\rho\mathcal{D}_i r^2}\, dr} \ln\left(1 + \frac{Y_{is} - Y_{i\infty}}{\delta_{i,A} - Y_{is}}\right)\,. \tag{E.27}$$

Il est intéressant de remarquer que l'expression du débit ainsi obtenue est explicite. Il reste ensuite à évaluer l'intégrale qui apparait dans l'expression du débit d'évaporation. En pratique, on utilise l'approximation suivante :

$$\frac{1}{\displaystyle\int_{r_s}^{+\infty} \frac{1}{4\pi\rho\mathcal{D}_i r^2}\, dr} \approx 4\pi\widetilde{\rho\mathcal{D}_i} r_s\,, \tag{E.28}$$

où $\widetilde{\rho\mathcal{D}_i}$ représente une valeur moyenne de $\rho\mathcal{D}_i$ que l'on estimera dans un état intermédiaire entre la surface de la goutte et l'infini (règle du "1/3-2/3" par exemple). Finalement, nous avons l'expression du débit évaporé en fonction des fractions massiques (à la surface et à l'infini) de l'espèce évaporante A :

$$\boxed{\dot{m} = 4\pi\widetilde{\rho\mathcal{D}_A} r_s \ln\left(1 + \frac{Y_{As} - Y_{A\infty}}{1 - Y_{As}}\right),} \tag{E.29}$$

et en fonction des fractions massiques des espèces non évaporantes ($i \neq A$) :

$$\boxed{\dot{m} = 4\pi\widetilde{\rho\mathcal{D}_i} r_s \ln\left(1 + \frac{Y_{i\infty} - Y_{is}}{Y_{is}}\right).} \tag{E.30}$$

Introduisons ensuite le nombre adimensionnel de Spalding massique :

$$\boxed{B_M = \frac{Y_{As} - Y_{A\infty}}{1 - Y_{As}}.} \tag{E.31}$$

Ce nombre permet d'écrire l'expression du débit évaporé simplement sous la forme

$$\boxed{\dot{m} = 4\pi\widetilde{\rho\mathcal{D}_A} r_s \ln(1 + B_M).} \tag{E.32}$$

Pour terminer, si pour $i \neq A$ on note B_i le rapport

$$B_i = \frac{Y_{i\infty} - Y_{is}}{Y_{is}}, \tag{E.33}$$

alors l'égalité entre les relations (E.29) et (E.30) conduit à

$$1 + B_i = (1 + B_M)^{a_i}, \tag{E.34}$$

où le terme $a_i = (\widetilde{\rho\mathcal{D}_A}/\widetilde{\rho\mathcal{D}_i}) = Sc_i/Sc_A$ représente le rapport des coefficients de diffusion des espèces A et i, autrement dit le rapport des nombres de Schmidt. Ainsi, il est possible d'exprimer les fractions massiques des espèces non évaporantes à la surface de la goutte, en fonction de leur fraction massique à l'infini et du nombre de Spalding de masse :

$$Y_{is} = \frac{Y_{i\infty}}{1 + B_i} = \frac{Y_{i\infty}}{(1 + B_M)^{a_i}}. \tag{E.35}$$

Ces relations sont utilisées pour déterminer les propriétés thermophysiques du mélange gazeux à l'état intermédiaire entre la surface et l'infini.

E.2.4 Intégration de l'équation liée au transfert de chaleur (E.8)

En notant que $h = \sum Y_i h_i$, la relation (E.8) se réécrit

$$\frac{d}{dr}\left(\rho v r^2 \left[\sum_{i=1}^{n_{esp}} Y_i h_i\right] - \lambda r^2 \frac{dT}{dr} - r^2 \left[\sum_{i=1}^{n_{esp}} \rho\mathcal{D}_i h_i \frac{dY_i}{dr}\right]\right) = 0. \tag{E.36}$$

En regroupant les termes liés à l'enthalpie d'espèce h_i, et en remarquant que $T = h_A/c_{p,A}$, il vient ensuite

$$\frac{d}{dr}\left(\sum_{i=1}^{n_{esp}} h_i \left[\rho v r^2 Y_i - \rho\mathcal{D}_i r^2 \frac{dY_i}{dr}\right] - \frac{\lambda r^2}{c_{p,A}} \frac{dh_A}{dr}\right) = 0. \tag{E.37}$$

Or, d'après la relation (E.22), le terme $\left[\rho v r^2 Y_i - \rho\mathcal{D}_i r^2 \frac{dY_i}{dr}\right]$ est une constante, égale par exemple aux valeurs prises au sein de la goutte, en $r < r_s$, là où $Y_i = \delta_{i,A}$, et où $\frac{dY_i}{dr} = 0$, $\forall i$. De plus, $\rho v r^2 = \dot{m}/4\pi$, et l'équation bilan d'enthalpie devient

$$\frac{d}{dr}\left(h_A \frac{\dot{m}}{4\pi} - \frac{\lambda r^2}{c_{p,A}} \frac{dh_A}{dr}\right) = 0 \qquad \Longrightarrow \qquad \frac{d}{dr}\left(h_A - \frac{4\pi\lambda r^2/c_{p,A}}{\dot{m}} \frac{dh_A}{dr}\right) = 0. \tag{E.38}$$

Nous retrouvons de nouveau l'équation type (E.9), avec

$$\alpha(r) = h_A(r) \qquad \beta(r) = 4\pi r^2 \frac{\lambda}{c_{p,A}} \,. \tag{E.39}$$

Le terme $\left(\frac{d\alpha}{dr}\right)_{r_s} \frac{\beta(r_s)}{\dot{m}}$ présent dans l'équation (E.21) vaut alors

$$\left(\frac{d\alpha}{dr}\right)_{r_s} \frac{\beta(r_s)}{\dot{m}} = \frac{4\pi}{\dot{m}} \left(\lambda r^2 \frac{dT}{dr}\right)_{r_s} \,. \tag{E.40}$$

Or, le flux de chaleur Q_g cédé par le mélange gazeux à la particule évaporante s'écrit précisément en coordonnées sphériques :

$$Q_g = 4\pi \left(\lambda r^2 \frac{dT}{dr}\right)_{r_s} \,. \tag{E.41}$$

Et il vient donc :

$$\left(\frac{d\alpha}{dr}\right)_{r_s} \frac{\beta(r_s)}{\dot{m}} = \frac{Q_g}{\dot{m}} \,. \tag{E.42}$$

D'après l'équation (E.21), l'expression suivante pour le débit d'évaporation est obtenue :

$$\dot{m} = \frac{1}{\displaystyle\int_{r_s}^{+\infty} \frac{c_{p,A}}{4\pi\lambda r^2} dr} \ln\left(1 + \frac{h_{A\infty} - h_{As}}{\dfrac{Q_g}{\dot{m}}}\right) \,. \tag{E.43}$$

On notera que l'expression du débit d'évaporation obtenue est ici implicite, contrairement à l'expression obtenue en (E.32) à partir de l'équation sur le transfert de masse. Ensuite, l'intégrale qui apparait au dénominateur doit être évaluée. En pratique, on utilise l'approximation

$$\frac{1}{\displaystyle\int_{r_s}^{+\infty} \frac{c_{p,A}}{4\pi\lambda r^2} dr} \approx 4\pi \frac{\widetilde{\lambda}}{\widetilde{c_{p,A}}} r_s \,, \tag{E.44}$$

où $\dfrac{\widetilde{\lambda}}{\widetilde{c_{p,A}}}$ représente une valeur moyenne de $\dfrac{\lambda}{c_{p,A}}$ estimée dans un état intermédiaire entre la surface de la goutte et l'infini. Nous avons également :

$$h_{A\infty} - h_{As} = \int_{T_s}^{T^\infty} c_{p,A} dT \,. \tag{E.45}$$

De même, en pratique, cette intégrale est évaluée sous une forme moyenne :

$$\int_{T_s}^{T^\infty} c_{p,A} dT \approx \widetilde{c_{p,A}} \, (T_\infty - T_s) \,, \tag{E.46}$$

où $\widetilde{c_{p,A}} = c_{p,A}(\widetilde{T})$, et $\widetilde{T}$ est la température du mélange gazeux dans l'état intermédiaire. Enfin, le flux de chaleur Q_g cédé par le gaz est supposé, dans le cas général, contribuer à la fois à échauffer la goutte à travers un flux de chauffage noté ϕ_c, et à l'évaporer. Rappelons qu'une hypothèse de conductivité thermique infinie au sein de la goutte a été faite. Il n'y a donc pas de flux de chaleur par conduction au sein de la goutte. Le flux de chauffage permet d'élever la température de surface, laquelle est supposée être égale à la température homogène de la goutte. Le flux de chaleur cédé par le gaz s'écrit par conséquent

$$Q_g = \phi_c + \dot{m} l_v(T_s) \,, \tag{E.47}$$

où $l_v(T_s)$ est la chaleur latente de vaporisation à la température de surface de la goutte. Elle correspond à l'énergie nécessaire pour briser les liaisons inter-moléculaires dans le liquide. Finalement, le débit d'évaporation obtenu en intégrant l'équation sur le transfert de chaleur s'écrit

$$\boxed{\dot{m} = 4\pi \frac{\widetilde{\lambda}}{\widetilde{c_{p,A}}} r_s \ln\left[1 + \frac{\widetilde{c_{p,A}} \, (T_\infty - T_s)}{\dfrac{\phi_c}{\dot{m}} + l_v(T_s)}\right] \,.} \tag{E.48}$$

Introduisons ensuite le nombre adimensionnel de Spalding thermique :

$$\boxed{B_T = \frac{\widetilde{c_{p,A}}\,(T_\infty - T_s)}{\dfrac{\phi_c}{\dot{m}} + l_v(T_s)}\,.} \tag{E.49}$$

Ainsi, le débit d'évaporation se note

$$\boxed{\dot{m} = 4\pi \frac{\widetilde{\lambda}}{\widetilde{c_{p,A}}} r_s \ln(1 + B_T)\ .} \tag{E.50}$$

Enfin, on notera que si l'on connait *a priori* le débit d'évaporation $\dot{m}$, et le nombre de Spalding thermique B_T, alors le flux de chauffage ϕ_c peut s'exprimer à partir de la relation (E.49) comme

$$\boxed{\phi_c = \frac{\dot{m}}{B_T}\widetilde{c_{p,A}}\,(T_\infty - T_s) - \dot{m}\, l_v(T_s)\,.} \tag{E.51}$$

E.2.5 Prise en compte des effets convectifs sur les échanges de chaleur et de masse

Les relations des paragraphes précédents ont été établies sous l'hypothèse d'une goutte en équilibre dynamique avec le gaz. Lorsque ce n'est pas le cas, il est nécessaire de corriger ces relations. En effet, le mouvement relatif de la goutte par rapport au gaz environnant augmente l'intensité des échanges de masse et de chaleur. Pour rendre compte de cet effet, les nombres adimensionnels de Sherwood et de Nusselt sont introduits dans les expressions du débit d'évaporation. Ils sont exprimés par des corrélations expérimentales telle que la corrélation de Frössling :

$$Sh = 2 + 0.6 Re_p^{1/2} Sc_A^{1/3}\,, \qquad Nu = 2 + 0.6 Re_p^{1/2} Pr^{1/3}\,, \tag{E.52}$$

où

$$Re_p = \frac{\widetilde{\rho_g}\|\boldsymbol{v}_g - \boldsymbol{v}_p\| D_p}{\widetilde{\mu}} \tag{E.53}$$

est le nombre de Reynolds particulaire, $D_p = 2r_s$ est le diamètre de la goutte, les termes $\widetilde{\rho_g}$ et $\widetilde{\mu}$ sont évalués dans l'état intermédiaire du mélange gazeux, et

$$Pr = \frac{\widetilde{\mu}\widetilde{c_{p,g}}}{\widetilde{\lambda}}\,, \qquad Sc_A = \frac{\widetilde{\mu}}{\widetilde{\rho}\widetilde{\mathcal{D}_A}} \tag{E.54}$$

sont respectivement les nombres de Prandtl et de Schmidt de l'espèce évaporante. De plus, $\widetilde{c_{p,g}}$ est la capacité thermique massique du mélange gazeux dans l'état intermédiaire (différente de celle de l'espèce évaporante à la température de l'état intermédiaire, notée $\widetilde{c_{p,A}}$). Ainsi, en utilisant le diamètre D_p plutôt que le rayon des gouttes, et en remarquant que les nombres de Sherwood et de Nusselt prennent la valeur 2 pour des particules en équilibre dynamique avec le gaz, l'effet de la convection conduit à écrire les deux expressions donnant le débit d'évaporation sous la forme :

$$\boxed{\dot{m} = \pi D_p \widetilde{\rho}\widetilde{\mathcal{D}_A} Sh \ln(1 + B_M)\ ,} \tag{E.55}$$

$$\boxed{\dot{m} = \pi D_p \frac{\widetilde{\lambda}}{\widetilde{c_{p,A}}} Nu \ln(1 + B_T)\ .} \tag{E.56}$$

E.2.6 Prise en compte de l'effet du film de vapeur entourant la goutte

Une amélioration supplémentaire du modèle, due à ABRAMZON et SIRIGNANO [5], consiste à considérer l'effet du film de vapeur de l'espèce évaporante entourant la goutte. Ce film de vapeur est en effet responsable d'une

diminution des transferts de chaleur et de masse. Pour rendre compte de cet effet, les nombres de Sherwood et de Nusselt sont ainsi corrigés :

$$Sh^* = 2 + \frac{Sh - 2}{F_M}\,, \qquad Nu^* = 2 + \frac{Nu - 2}{F_T}\,, \tag{E.57}$$

où les facteurs de film $F_M = F(B_M)$ et $F_T = F(B_T)$ sont donnés par

$$F(B) = (1 + B)^{0.7}\,\frac{\ln(1 + B)}{B}\,. \tag{E.58}$$

Pour déterminer ces expressions, les auteurs ont étudié un écoulement de type couche limite laminaire en évaporation. Ils ont alors montré qu'en considérant une température de surface uniforme et des propriétés physiques du liquide constantes, les facteurs de film correctifs F_M et F_T ne dépendaient que faiblement des nombres de Reynolds, Schmidt et Prandtl, et pouvaient être approchés par la relation précédente.

E.2.7 Synthèse

La démarche menée précédemment permet d'aboutir à une description couplée des phénomènes de transferts de masse et de chaleur à la surface de la goutte. Cette description est suffisamment simplifiée pour s'intégrer de manière efficace dans la résolution des systèmes d'équations des particules (solveur SPIREE) et du mélange gazeux (solveur CHARME). En effet, nous disposons alors de formulations algébriques pour exprimer le débit d'évaporation $\dot{m}$ et le flux de chauffage ϕ_c, sans qu'il soit nécessaire de résoudre des équations de transport à l'échelle de la goutte. Dans une approche "multi-classes", ces termes sont simplement multipliés par la densité volumique de gouttes afin d'obtenir les termes sources à intégrer aux équations de conservation de la masse et de l'énergie. Dans une approche sectionnelle, ils doivent en revanche être intégrés sur l'espace des tailles. En résumé, le modèle d'évaporation complet peut-être décrit sous sa forme la plus générale par les équations (E.59) à (E.68).

$$Sh = 2 + 0.6 Re_p^{1/2} Sc_A^{1/3} \tag{E.59}$$

$$Nu = 2 + 0.6 Re_p^{1/2} Pr^{1/3} \tag{E.60}$$

$$B_M = \frac{Y_{As} - Y_{A\infty}}{1 - Y_{As}} \tag{E.61}$$

$$B_T = \frac{\widetilde{c_{p,A}}\,(T_\infty - T_s)}{\dfrac{\phi_c}{\dot{m}} + l_v(T_s)} \tag{E.62}$$

$$F(B) = (1 + B)^{0.7}\,\frac{\ln(1 + B)}{B} \tag{E.63}$$

$$Sh^* = 2 + \frac{Sh - 2}{F(B_M)} \tag{E.64}$$

$$Nu^* = 2 + \frac{Nu - 2}{F(B_T)} \tag{E.65}$$

$$\dot{m} = \pi D_p \rho \widetilde{\mathcal{D}_A} Sh^* \ln(1 + B_M) \tag{E.66}$$

$$\dot{m} = \pi D_p \frac{\widetilde{\lambda}}{\widetilde{c_{p,A}}} Nu^* \ln(1 + B_T) \tag{E.67}$$

$$\phi_c = \frac{\dot{m}}{B_T}\widetilde{c_{p,A}}\,(T_\infty - T_s) - \dot{m}\, l_v(T_s) \tag{E.68}$$

Dans la section suivante, les différents algorithmes de résolution disponibles dans SPIREE sont présentés. Ils correspondent en fait à des variantes du modèle général, suivant les hypothèses simplificatrices éventuellement faites.

E.3 Algorithmes de résolution numérique

E.3.1 Modèle de chauffage et évaporation découplés

Tout d'abord, il est possible de simplifier fortement la résolution numérique, en faisant l'hypothèse que la phase de chauffage de la goutte est découplée de la phase d'évaporation. En d'autres termes, le flux de chaleur cédé par le gaz est supposé ne servir qu'à réchauffer la goutte dans un premier temps, tant que la température de la goutte est inférieure à sa température de saturation :

$$\begin{cases} Q_g = \phi_c \\ \\ \dot{m} = 0 \end{cases} \qquad \text{si } T_s < T_{sat}\,. \tag{E.69}$$

Puis, dès que la goutte a atteint sa température de saturation, tout le flux de chaleur cédé par le gaz contribue à l'évaporation (on parle d'ailleurs plutôt d'ébullition), et le flux de chauffage devient nul :

$$\begin{cases} Q_g &= \dot{m}\, l_v(T_{sat}) \\ & \qquad \text{si } T_s = T_{sat}\ . \\ \phi_c &= 0 \end{cases} \tag{E.70}$$

Ce modèle correspond au modèle de WILLIAMS [301]. Il n'est basé que sur la description du transfert de chaleur, et n'utilise donc pas l'expression du débit provenant du transfert de masse.

E.3.1.1 Détermination du flux de chauffage pendant la première phase

Pendant la phase de chauffage, le débit d'évaporation est supposé nul. Faisons donc tendre vers 0 le débit d'évaporation dans l'expression du nombre de Spalding thermique donné en (E.62). Il vient :

$$\lim_{\dot{m}\to 0} B_T = \frac{\dot{m}}{\phi_c}\widetilde{c_{p,A}}\,(T_\infty - T_s) = 0\ . \tag{E.71}$$

En procédant de manière analogue dans l'expression (E.67) donnant le débit en fonction de B_T, il vient :

$$\lim_{B_T\to 0} \dot{m} = \pi D_p \frac{\widetilde{\lambda}}{\widetilde{c_{p,A}}} Nu^* B_T = \pi D_p \frac{\widetilde{\lambda}}{\widetilde{c_{p,A}}} Nu^* \frac{\dot{m}}{\phi_c}\widetilde{c_{p,A}}\,(T_\infty - T_s)\ . \tag{E.72}$$

Finalement, l'expression retenue pour le flux de chaleur, en cas de débit d'évaporation nul, est donc :

$$\boxed{\phi_c = \pi D_p \widetilde{\lambda} Nu\,(T_\infty - T_s)\ .} \tag{E.73}$$

On aura noté que le facteur de film thermique tend vers 1 si B_T tend vers 0, ce qui signifie que $Nu^* = Nu$.

E.3.1.2 Détermination du débit d'évaporation pendant la seconde phase

La goutte a atteint la température de saturation, le flux de chauffage ϕ_c est désormais nul, tandis que le débit d'évaporation est strictement positif. Ainsi, le nombre de Spalding thermique B_T ne dépend plus du débit d'évaporation, et s'écrit

$$B_T = \frac{\widetilde{c_{p,A}}\,(T_\infty - T_s)}{0 + l_v(T_s)} = \frac{\widetilde{c_{p,A}}\,(T_\infty - T_s)}{l_v(T_s)}\ . \tag{E.74}$$

Le débit d'évaporation est alors déterminé de manière explicite par la relation :

$$\boxed{\dot{m} = \pi D_p \frac{\widetilde{\lambda}}{\widetilde{c_{p,A}}} Nu^* \ln(1 + B_T)\ .} \tag{E.75}$$

Remarques :

- Ce modèle s'applique particulièrement dans le cas d'une goutte s'évaporant dans sa propre vapeur. Dans ce cas, en effet, l'évaporation ne peut avoir lieu qu'à la température de saturation. Par ailleurs, dans ce type de configuration mono-espèce nous avons $Y_{A\infty} = Y_{As} = 1$, et par conséquent le calcul d'un nombre de Spalding de masse B_M n'a pas de sens physiquement, et est indeterminé mathématiquement.
- Ce modèle peut également être utilisé dans des configurations multi-espèces, si le temps de chauffage des gouttes jusqu'à leur température de saturation est négligeable devant le temps total d'évaporation des gouttes. En effet, ce modèle ne diffère du modèle général que pendant la phase de chauffage (voir les résultats présentés au paragraphe § E.3.3).
- Ce modèle est appelé "Chauffage puis évaporation" dans SPIREE. Notons toutefois une légère différence : dans le code, le nombre de Nusselt utilisé dans l'expression du débit d'évaporation n'est pas le Nu^*, c'est-à-dire le nombre de Nusselt corrigé par l'effet du film de vapeur, mais simplement le nombre de Nusselt obtenu par la corrélation (E.52).

E.3.2 Résolution du modèle général

Considérons désormais le modèle général, c'est-à-dire sans faire l'hypothèse que le chauffage et l'évaporation de la goutte sont découplés. L'algorithme de résolution consiste alors à évaluer successivement les différents termes qui permettent d'obtenir le débit d'évaporation, puis le flux de chaleur, tels que décrits en § E.2.7. Les différentes étapes de l'algorithme sont donc les suivantes :

1. détermination de la pression de vapeur saturante $P_{sat}(T_s)$, à partir de corrélations dédiées.
2. détermination de x_{As}, la fraction molaire de l'espèce évaporante à la surface de la goutte. Pour cela, la loi de Dalton reliant les pressions partielles de vapeur à la pression totale pour un mélange idéal de gaz parfaits donne tout d'abord :
$$x_i = \frac{P_i}{P_\infty} , \quad 1 \leq i \leq n_{esp} , \tag{E.76}$$
où P_i est la pression partielle de vapeur de l'espèce i et P_∞ la pression totale du mélange gazeux. Ensuite :
   - soit la vapeur de l'espèce évaporante A est supposée être en ***équilibre thermodynamique*** avec le liquide (MAURIOT et PRUD'HOMME [189]), ce qui implique que la pression partielle P_A est égale à la pression de vapeur saturante P_{sat}, et donc que l'on a :
$$x_{As} = x_{As,eq} = \frac{P_{sat}}{P_\infty} . \tag{E.77}$$
   - soit on souhaite prendre en compte des effets de non équilibre. Suivant les modèles, il peut s'agir d'apporter seulement une correction à la fraction molaire d'équilibre, ou bien d'adopter une écriture différente pour le débit d'évaporation. Les problèmes de robustesse numérique traités ici ne sont pas corrélés à l'utilisation ou non des corrections de non-équilibre, aussi la description de ces corrections ne sera pas davantage approfondie ici.
3. détermination de la fraction massique de l'espèce évaporante à la surface :
$$Y_{As} = \frac{x_{As}\left(\frac{M_A}{M_\infty - Y_{A\infty}}\right)}{x_{As}\left(\frac{M_A}{M_\infty - Y_{A\infty}}\right) + (1 - Y_{A\infty})(1 - x_{As})} , \tag{E.78}$$
où $Y_{A\infty}$ est la fraction massique de l'espèce évaporante à l'infini, M_A et M_∞ étant les masses molaires de l'espèce évaporante et du mélange gazeux à l'infini.
4. calcul du nombre de Spalding de masse :
$$B_M = \frac{Y_{As} - Y_{A\infty}}{1 - Y_{As}} . \tag{E.79}$$
Le calcul de ce nombre ne pose pas de problème si $Y_{As} < 1$, mais il est indéterminé si $Y_{As} = 1$, ce qui est possible dans deux cas de figure :
   - cas d'une goutte dans sa propre vapeur. Le gaz est mono-espèce, et donc $Y_{As} = Y_{A\infty} = 1$. En plus d'être indéterminé mathématiquement, le calcul du B_M n'a pas de sens physiquement. Dans ce cas précis, l'évaporation de la goutte ne peut avoir lieu qu'à la température de saturation, pilotée uniquement par le transfert de chaleur. Il s'agit typiquement d'une configuration où le modèle de chauffage et évaporation découplés doit être utilisé.
   - cas d'un mélange gazeux multi-espèces, c'est-à-dire $Y_{A\infty} < 1$, mais où la goutte a atteint sa température de saturation $T_{sat}(P_\infty)$. Ainsi, $P_{sat}(T_{sat}) = P_\infty$, et donc $Y_{As} = x_{As} = 1$. Notons que pour $Y_{As} < 1$ mais $Y_{As} \to 1$ (c'est-à-dire pour $T_s \to T_{sat}$), le calcul de B_M est possible mais tend vers l'infini... Cette configuration pose des problèmes de robustesse, ce que nous verrons par la suite. Pour la suite de l'algorithme, supposons que nous avons $Y_{As} < 1$, et que nous avons pu calculer B_M.
5. calcul des fractions massiques des espèces non évaporantes à la surface :
$$Y_{is} = \frac{Y_{i\infty}}{(1 + B_M)^{a_i}} , \qquad a_i = (\widetilde{\rho\mathcal{D}_A}/\widetilde{\rho\mathcal{D}_i}) = Sc_i/Sc_A . \tag{E.80}$$
6. calcul des propriétés thermophysiques de l'état intermédiaire du mélange gazeux, $\widetilde{f} = f(\widetilde{T}, \widetilde{Y_i})$, où $f = \lambda, \mu, c_{p,A}, c_{p,g}, Pr, Le...$, et :
$$\widetilde{T} = T_s + \frac{1}{3}(T_\infty - T_s) , \qquad \widetilde{Y_i} = Y_{is} + \frac{1}{3}(Y_{i\infty} - Y_{is}) . \tag{E.81}$$

7. calcul du facteur de film massique :

$$F_M = (1 + B_M)^{0.7} \frac{\ln(1 + B_M)}{B_M} . \tag{E.82}$$

8. calcul de Nu et Sh, c'est-à-dire les nombres de Nusselt et de Sherwood obtenus par la corrélation de Frössling tenant compte des effets convectifs :

$$Sh = 2 + 0.6 Re_p^{1/2} Sc_A^{1/3} , \qquad Nu = 2 + 0.6 Re_p^{1/2} Pr^{1/3} . \tag{E.83}$$

9. calcul du nombre de de Sherwood modifié par l'effet de film :

$$Sh^* = 2 + \frac{Sh - 2}{F_M} . \tag{E.84}$$

10. calcul itératif du nombre de Spalding thermique. L'égalité des relations (E.66) et (E.67) exprimant le débit d'évaporation, à partir du transfert de masse ou du transfert de chaleur, permet d'écrire

$$\widetilde{\rho \mathcal{D}_A} Sh^* \ln(1 + B_M) = \frac{\widetilde{\lambda}}{\widetilde{c_{p,A}}} Nu^* \ln(1 + B_T) , \tag{E.85}$$

puis

$$\phi \ln(1 + B_M) = \ln(1 + B_T) \qquad \Longrightarrow \qquad B_T = (1 + B_M)^{\phi} - 1 , \tag{E.86}$$

avec

$$\phi = \widetilde{\rho \mathcal{D}_A} \frac{\widetilde{c_{p,A}}}{\widetilde{\lambda}} \frac{Sh^*}{Nu^*} = \frac{\widetilde{c_{p,A}}}{\widetilde{c_{p,g}}} \frac{Sh^*}{Nu^*} \frac{1}{\widetilde{Le}_A} , \qquad \widetilde{Le}_A = \frac{\widetilde{\lambda}}{\widetilde{\rho \mathcal{D}_A} \widetilde{c_{p,g}}} . \tag{E.87}$$

Le facteur ϕ est fonction de B_T puisque

$$Nu^* = 2 + \frac{Nu - 2}{F_T} , \qquad F_T = (1 + B_T)^{0.7} \frac{\ln(1 + B_T)}{B_T} . \tag{E.88}$$

La détermination de B_T nécessite donc un processus itératif, par exemple par une méthode de point fixe. On présume une valeur initiale B_T^n, on calcule la valeur de Nu^* correspondante, puis celle de ϕ, et enfin une nouvelle valeur B_T^{n+1}, les termes B_M, Sh^*, $\widetilde{Le}$, $\widetilde{c_{p,A}}$ et $\widetilde{c_{p,g}}$ étant constants. Le procédé est répété jusqu'à atteindre la convergence souhaitée.

11. calcul du débit d'évaporation par la formule explicite le reliant au nombre de Spalding de masse :

$$\dot{m} = \pi D_p \widetilde{\rho \mathcal{D}_A} Sh^* \ln(1 + B_M) . \tag{E.89}$$

12. calcul du flux de chauffage de la goutte (différence entre le flux de chaleur total cédé par le gaz et l'énergie nécessaire à l'évaporation) :

$$\phi_c = \frac{\dot{m}}{B_T} \widetilde{c_{p,A}} (T_\infty - T_s) - \dot{m}\, l_v(T_s) . \tag{E.90}$$

Cet algorithme de résolution est donc celui utilisé pour les modèles généraux avec ou sans prise en compte du déséquilibre à la surface.

E.3.3 Problématiques de robustesse avec l'algorithme de résolution du modèle général

Afin de mettre en avant les problématiques de robustesse liées au modèle général d'évaporation, considérons le cas de l'évaporation de gouttes d'oxygène liquide dans de l'hydrogène gazeux, caractéristique de la propulsion liquide. Soit une géométrie bidimensionnelle rectangulaire de 1 m sur 20 cm, sur laquelle nous projetons un maillage cartésien de 20 mailles (deux rangées de 10 mailles). Les conditions aux limites sont définies en périodicité "est-ouest" et "nord-sud". Le calcul CEDRE implique les solveurs CHARME et SPIREE, en 2-way coupling. CHARME fonctionne en mode "Euler", avec 2 espèces de type gaz parfait : H_2 et O_2. Une seule classe de particules est considérée dans SPIREE, et les gouttes sont formées de l'espèce O_2. Le pas de temps de la simulation est fixé à $\Delta t = 10^{-6}$ s. Les états initiaux, uniformes, sont définis comme suit dans chaque solveur :

CHARME :
- $Y_{H_2} = 1$, $Y_{O_2} = 0$
- $P_\infty = 10$ bar
- $T_\infty = 700$ K
- $v_\infty = v_x = 100$ m/s

SPIREE :
- $T_p = 100$ K
- $D_p = 50\ \mu$m
- $v_p = v_{px} = 50$ m/s
- $\alpha = 10^{-6}$ (fraction volumique du spray)

Notons que vue la faible fraction volumique de gouttes initiale ($\alpha = 10^{-6}$), les propriétés du gaz à l'infini, (c'est-à-dire les valeurs de maille dans CHARME), sont très peu modifiées au cours du calcul. Bien que les calculs soient faits en mode "two-way coupling", il est possible de raisonner en considérant que les propriétés du gaz restent constantes à l'infini.

Ce cas a été simulé en utilisant les trois modèles disponibles dans SPIREE, à savoir le modèle de chauffage et évaporation découplés (nommé "Chauffage puis Evaporation" dans EPICEA), puis le modèle général, sans prise en compte d'effets de non-équilibre (nommé "Abramzon-Sirignano" dans EPICEA), ou avec prise en compte d'effets de non équilibre (nommé "Cinétique d'évaporation" dans EPICEA).

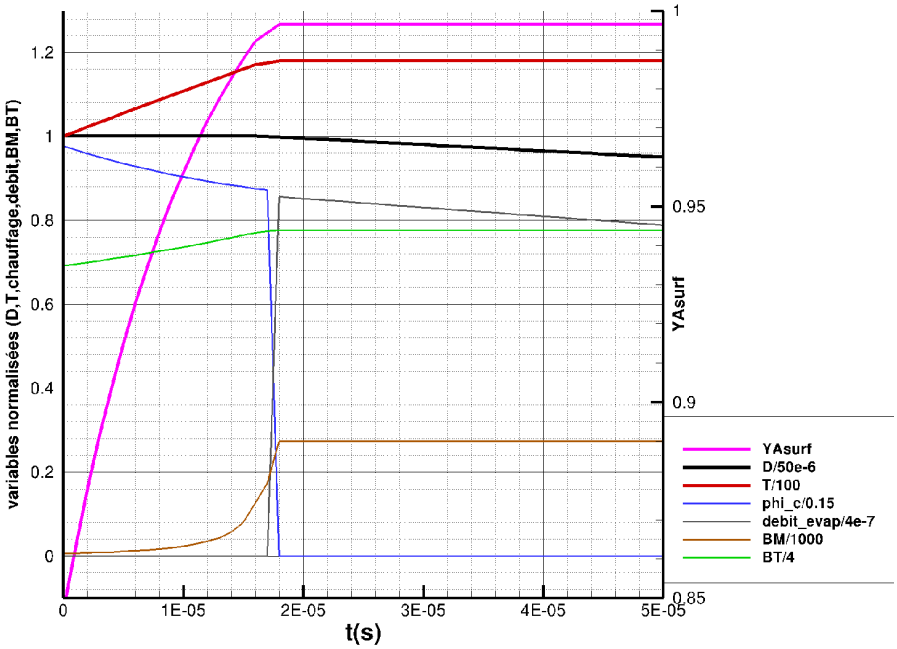


FIGURE E.2 – ***Modèle de chauffage et évaporation découplés. Zoom sur la période de chauffage.***

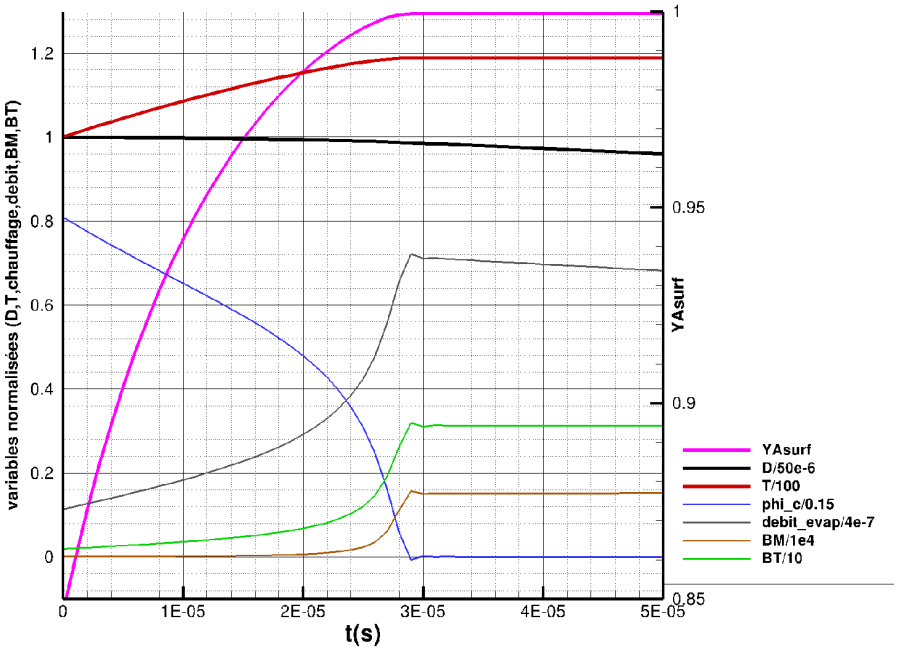


FIGURE E.3 – ***Modèle général avec équilibre ("Abramzon-Sirignano"). Zoom sur la période de chauffage.***

Les Figure E.2 à Figure E.7 représentent l'évolution des variables liées à l'évaporation au cours du temps. Certaines figures représentent toute la durée de calcul, jusqu'à la disparition des gouttes, d'autres sont des zooms sur la période initiale de chauffage des gouttes jusqu'à leur température de saturation. Par ailleurs, les variables

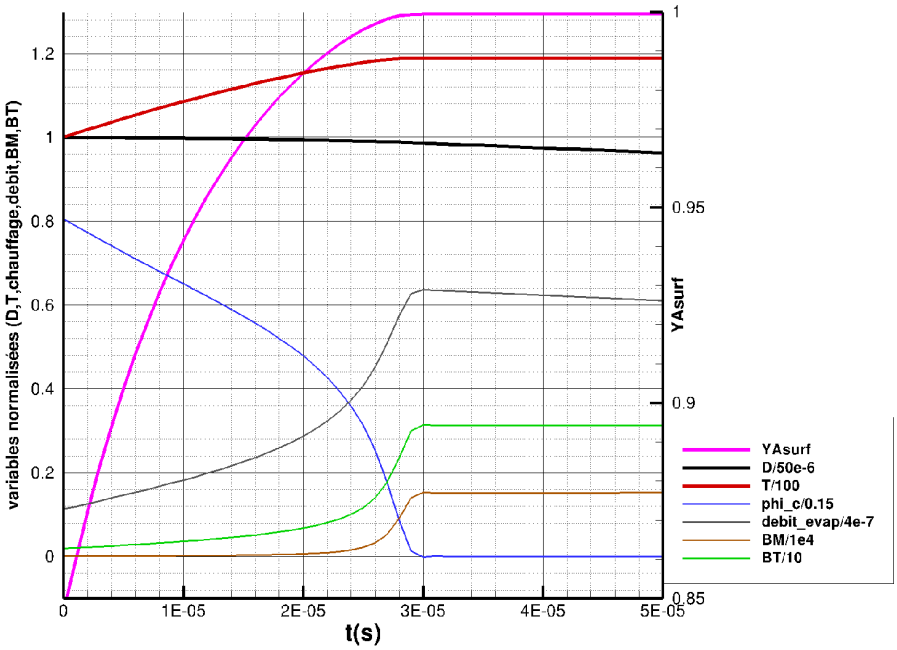


FIGURE E.4 – *Modèle général en non équilibre ("Cinétique d'évaporation"). Zoom sur la période de chauffage.*

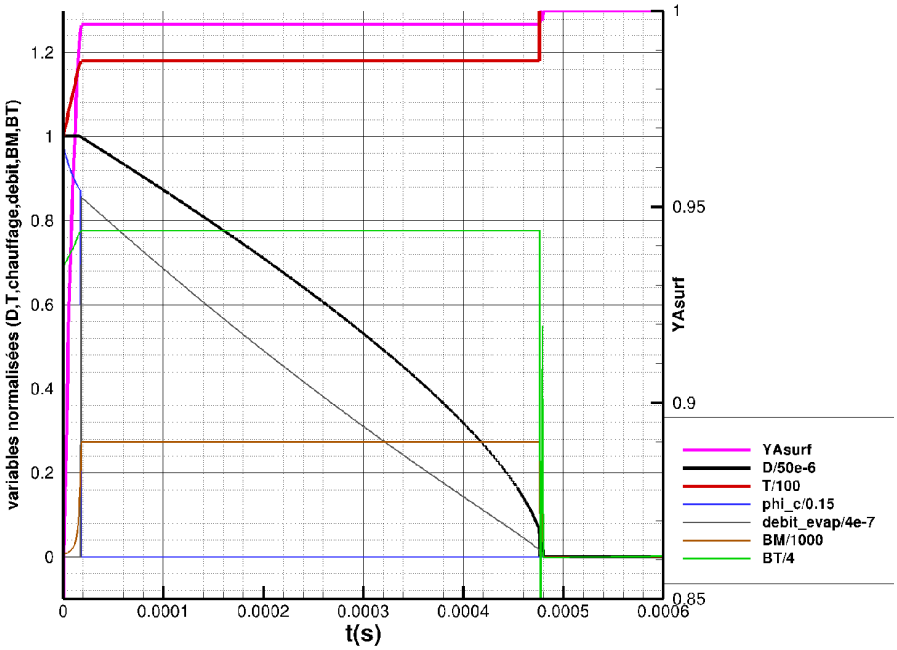


FIGURE E.5 – *Modèle de chauffage et évaporation découplés.*

ont toutes été normalisées, comme indiqué sur la légende de chaque figure, de manière à pouvoir comparer leurs évolutions respectives sur une seule figure.

E.3.3.1 Comparaison des modèles durant la période de chauffage

Comparons grâce aux Figure E.2, Figure E.3, et Figure E.4, le comportement des trois modèles durant la période initiale de chauffage jusqu'à la température de saturation, à savoir $T_{sat}(P_\infty = 10\,\text{bar}) \approx 119$ K. Avec le modèle de chauffage et évaporation découplés (cf. Figure E.2) :

- conformément aux hypothèses du modèle, le débit d'évaporation est nul, le diamètre des gouttes n'évolue donc pas.
- la période de chauffage dure environ 18 μs. Elle est plus courte que dans le cas du modèle général (environ

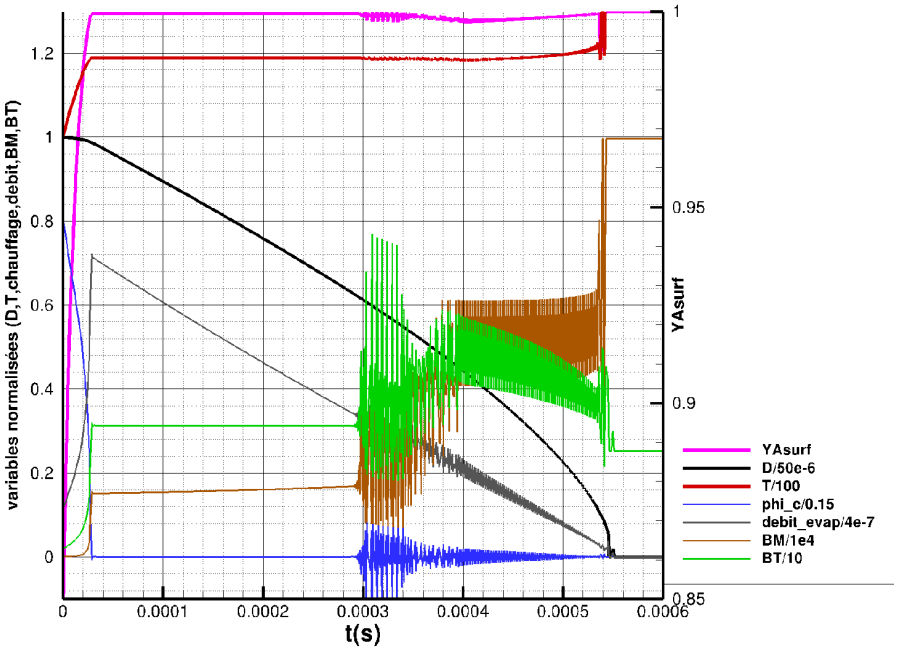


FIGURE E.6 – *Modèle général avec équilibre ("Abramzon-Sirignano").*

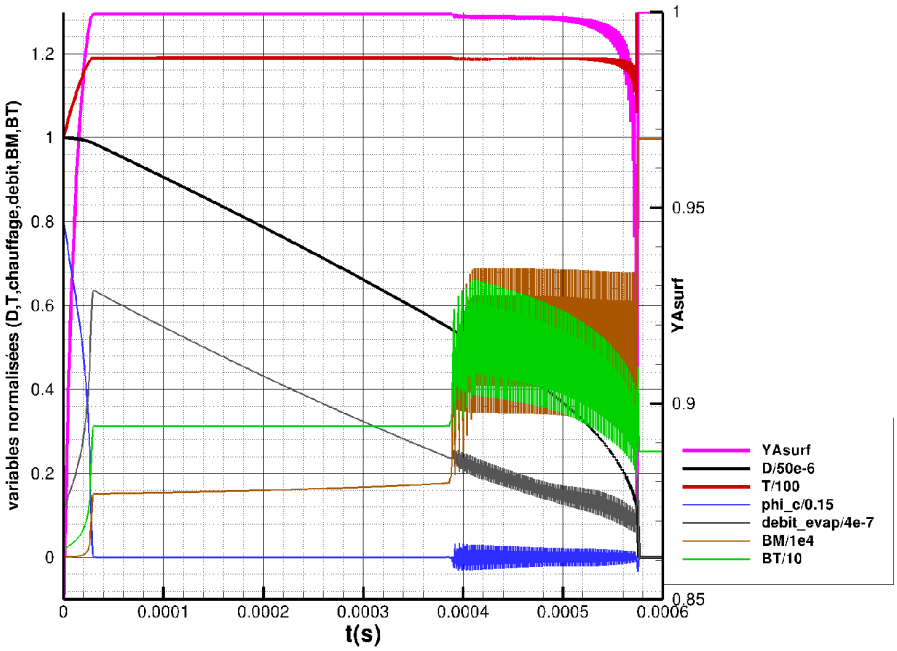


FIGURE E.7 – *Modèle général en non équilibre ("Cinétique d'évaporation").*

30 μs, voir les Figure E.3 et Figure E.4). En effet, le flux de chaleur cédé par le gaz est ici totalement dédié à chauffer la goutte, qui atteint donc sa température de saturation plus rapidement que lorsque une partie de ce flux est utilisée pour l'évaporation.

Avec le modèle général, que l'on tienne compte ou non du non-équilibre (cf. Figure E.3 et Figure E.4), le comportement est le suivant :

- le flux de chauffage est positif, et conduit à une augmentation de la température des gouttes. Il s'ensuit une augmentation de la pression de vapeur saturante, et donc une augmentation visible de la fraction massique de l'espèce évaporante à la surface de la goutte. Ainsi, le nombre de Spalding de masse augmente, et le débit d'évaporation également.
- la température approchant la température de saturation, le flux de chauffage diminue. A la fin de la période de chauffage, une transition nette s'opère. Le flux de chaleur semble devenir nul, la température semble se

stabiliser à T_{sat}, et donc la fraction massique de surface et les nombres de Spalding paraissent également se stabiliser. Le débit d'évaporation se met lui logiquement à décroitre, suivant l'évolution du diamètre des gouttes.

E.3.3.2 Comparaison des modèles durant la période d'ébullition

Comparons ensuite le comportement des modèles durant la période d'ébullition (cf. Figure E.5, Figure E.6, et Figure E.7). Avec le modèle de chauffage et évaporation découplés :

– les gouttes ont atteint leur température de saturation. Le flux de chaleur est imposé nul, la température est figée, ainsi que B_T. Le débit d'évaporation décroit, uniquement en raison de la diminution du diamètre des gouttes.

Avec le modèle général, avec ou sans prise en compte du non-équilibre, le comportement est le suivant :

– le flux de chauffage semble nul, et la température semble avoir atteint la température de saturation. En réalité, ce n'est pas exactement le cas. Dans ce modèle, le flux de chauffage est calculé par la relation (E.68), c'est-à-dire comme la différence de deux termes, le second terme incluant la chaleur latente de vaporisation, obtenue par une corrélation. Ce faisant, le calcul du flux de chauffage ne peut raisonnablement pas renvoyer strictement la valeur 0, il existe un résidu numérique.

– la température continue donc d'augmenter légèrement. Il en va alors de même pour la pression de vapeur saturante, puis pour la fraction massique en surface, qui se rapproche de plus en plus de 1. Cette augmentation n'est pas perceptible sur les figures, mais on peut l'apercevoir indirectement via l'augmentation de B_M.

– puis, il vient un moment où ce processus se met à diverger. Quand le diamètre, et donc la masse des gouttes diminuent, le fait que le flux de chauffage ne soit pas strictement nul a de plus en plus d'effet sur l'élévation de l'enthalpie et donc de la température. Cette augmentation est très faible, néanmoins elle a pour effet de faire tendre la fraction massique en surface vers 1, et donc de provoquer une augmentation de B_M bien plus sensible, ce paramètre étant proportionnel à $1/(1 - Y_{As})$. Le débit d'évaporation augmente alors, le flux de chaleur se met à osciller autour de 0, et toutes les variables étant couplées, elles se mettent également à osciller.

– ces oscillations sont fortes, mais se stabilisent ensuite et permettent de poursuivre le calcul de l'évaporation jusqu'à son terme. **Mais ceci est seulement possible parce qu'une limitation totalement arbitraire de la valeur de B_M avait été introduite dans le code**. Si cette limitation est désactivée, les oscillations ne font que s'amplifier, et la simulation ne peut en aucun cas parvenir à son terme.

En résumé, il faut impérativement forcer le modèle à adopter le bon comportement lorsqu'il est amené à traiter une configuration d'ébullition, et adapter les équations résolues en conséquence. C'est ce que nous allons voir dans le paragraphe suivant.

E.3.4 Mise en place d'un modèle hybride

La mise en place d'un modèle d'évaporation "hybride" a vocation à résoudre les problèmes de robustesse décrits précédemment. Nous venons de voir que ceux-ci provenaient de l'incapacité du modèle général à stabiliser la valeur du flux de chauffage à zéro, une fois que la goutte semble atteindre sa température de saturation. Aussi, considérant une cellule de calcul donnée, le modèle "hybride" va simplement consister, à :

– utiliser le modèle général si la température de la goutte est inférieure à la température de saturation (moins une certaine tolérance).

– imposer un flux de chauffage nul si la température de la goutte est suffisamment proche de la température de saturation, et donc calculer le débit d'évaporation par la relation le reliant à B_T, cette relation devenant explicite du fait de la nullité du flux de chauffage.

$$\phi_c = 0 \quad \Longrightarrow \quad B_T = \frac{\widetilde{c_{p,A}}\,(T_\infty - T_s)}{0 + l_v(T_s)} \quad \Longrightarrow \quad \dot{m} = \pi D_p \frac{\widetilde{\lambda}}{\widetilde{c_{p,A}}} Nu^* \ln(1 + B_T) \tag{E.91}$$

Autrement dit, il s'agit simplement de bifurquer, selon la valeur de la température de la goutte comparée à la température de saturation, entre l'algorithme du modèle général et celui de la phase d'ébullition du modèle de chauffage et évaporation découplés. Notons toutefois que nous utilisons alors le nombre de Nusselt corrigé Nu^*, quand le modèle "Chauffage puis Evaporation" n'utilise lui que le nombre de Nusselt issu de la corrélation de

Frössling, sans la correction. Par ailleurs, quand le modèle général est utilisé, il peut l'être avec ou sans la correction liée au non-équilibre thermodynamique à la surface des gouttes. Ce choix est laissé à l'utilisateur via l'interface EPICEA. Pour information, les calculs utilisant ce modèle hybride, présentés sur les figures ci-dessous, ont été réalisés en activant la correction de non-équilibre.

De plus, en pratique, et par sécurité, la bifurcation se fait à une température $T_{sat} - \epsilon_{sat}$ très légèrement inférieure à la valeur de T_{sat}. La valeur par défaut du paramètre ϵ_{sat} est fixée à 0.5 K. Elle peut éventuellement être modifiée par l'utilisateur à travers l'interface EPICEA. L'influence de ce paramètre est assez simple à comprendre : il stoppe le chauffage de la goutte à une température légèrement inférieure à sa température maximale théorique. Elle doit donc être la plus faible possible, afin de ne pas introduire d'inconsistence physique. Cependant, elle ne doit pas être trop faible non plus, au risque d'utiliser le modèle général dans la zone où peuvent apparaitre les oscillations décrites précédemment.

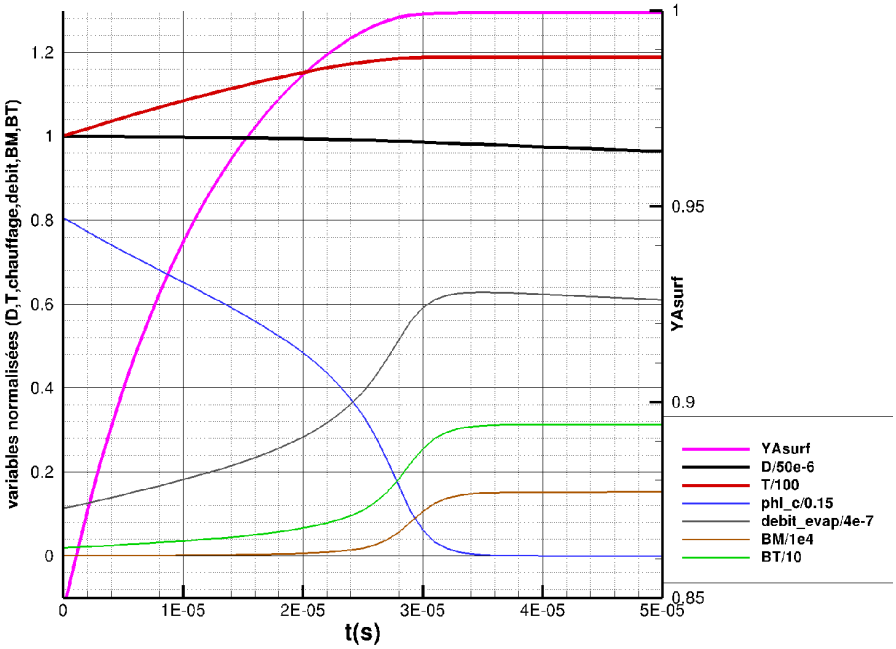


FIGURE E.8 – ***Modèle hybride,*** $\epsilon_{sat} = 0K$***. Zoom sur la période de chauffage.***

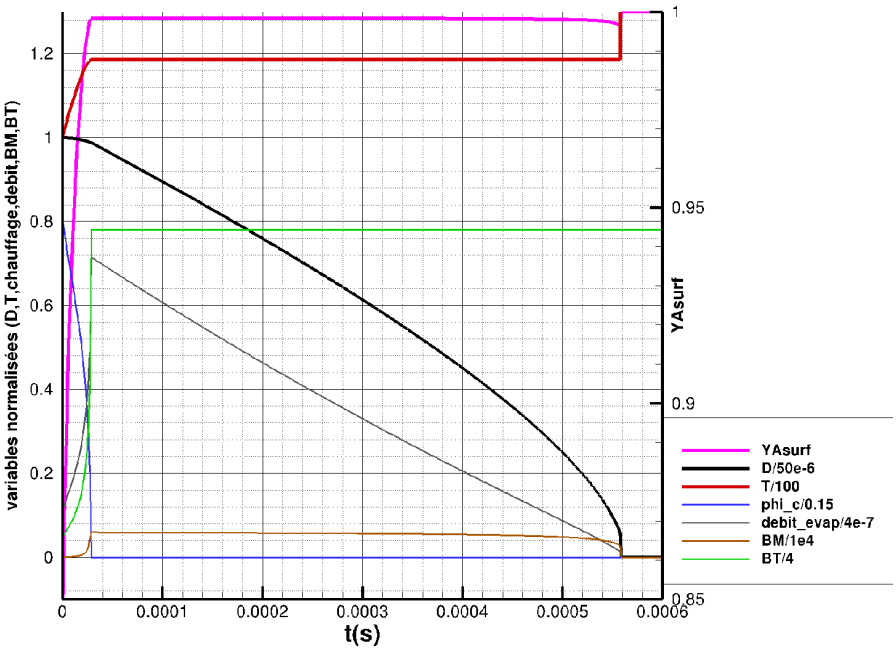


FIGURE E.9 – ***Modèle hybride,*** $\epsilon_{sat} = 0.5K$***.***

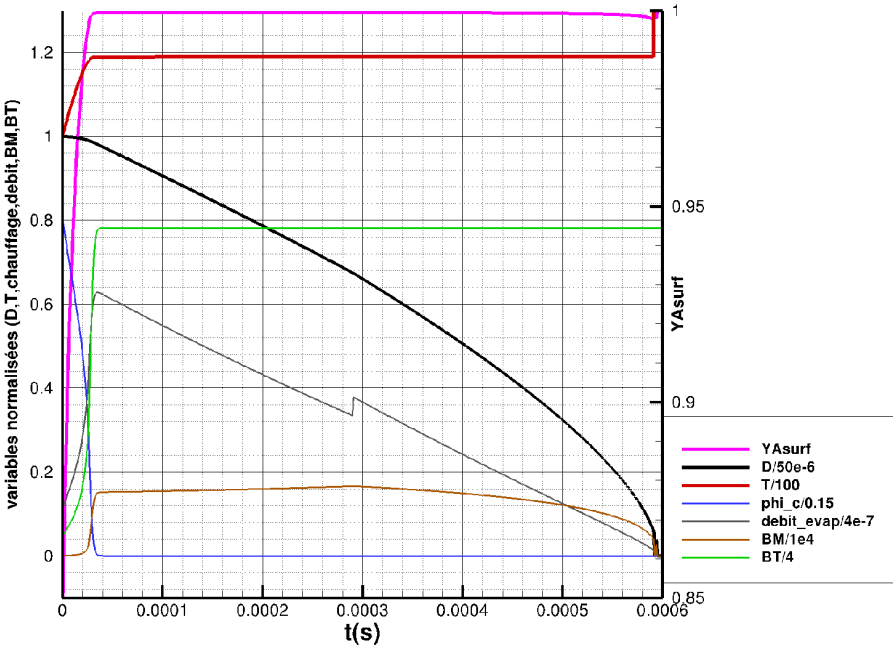


FIGURE E.10 – *Modèle hybride,* $\epsilon_{sat} = 0.1K$.

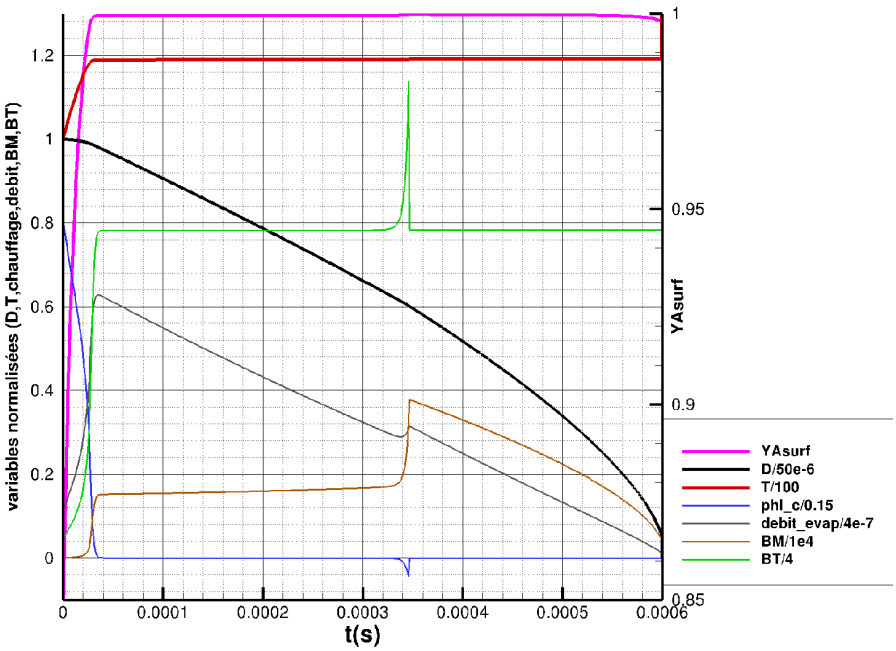


FIGURE E.11 – *Modèle hybride,* $\epsilon_{sat} = 0K$.

Les Figure E.9, Figure E.10, et Figure E.11 présentent les historiques obtenus avec le modèle hybride pour trois valeurs différentes du paramètre ϵ_{sat}, à savoir : $0.5K$, $0.1K$, et $0K$. En outre, la Figure E.8 présente un zoom au niveau de la période initiale de chauffage, pour le calcul avec $\epsilon_{sat} = 0K$. Ces résultats amènent les remarques suivantes :

- la comparaison des Figure E.8 et Figure E.4 permet de vérifier que pendant la période de chauffage où $T_s < T_{sat}$, le modèle hybride, utilisé ici avec les corrections de non-équilbre, redonne bien strictement les mêmes résultats que ceux du modèle "Cinétique d'évaporation" déjà implanté.
- ensuite, suivant la valeur du paramètre ϵ_{sat}, il est possible de voir à quel moment se situe la transition à partir de laquelle le flux de chauffage est imposé strictement nul, et le débit d'évaporation est calculé avec le relation le reliant à B_T. Ainsi, pour $\epsilon_{sat} = 0.5K$ (cf. Figure E.9), cette transition n'est pas visible, elle s'effectue dès la fin de la phase de chauffage. En revanche, pour les deux autres valeurs de ϵ_{sat}, la température atteinte à la

fin de la phase de chauffage n'est pas supérieure à $T_{sat} - \epsilon_{sat}$. Ainsi, la phase d'ébullition qui suit continue d'être traitée par le modèle général, avec un flux de chaleur qui est donc calculé (il n'est pas imposé nul), et en l'occurrence très légèrement positif. La température continue donc d'augmenter très légèrement, jusqu'à ce qu'elle devienne supérieure à $T_{sat} - \epsilon_{sat}$, et donc que l'on puisse observer la transition. Dans le cas où $\epsilon_{sat} = 0.1K$ (cf. Figure E.10), on observe la transition par une légère discontinuité du débit d'évaporation ($t \approx 280\,\mu$s), qui devient calculé par l'expression le reliant à B_T, et non plus par celle le reliant à B_M. Dans le cas où $\epsilon_{sat} = 0K$ (cf. Figure E.11), on constate que quand $T_s = T_{sat}$ et que donc la transition s'effectue, le modèle général a en fait déjà commencé à diverger. En effet, le flux de chauffage est devenu sensiblement négatif et décroit, le nombre B_T n'est plus constant, et le débit d'évaporation avait commencé à augmenter. On voit donc l'intérêt de choisir une valeur de ϵ_{sat} suffisante. D'autant plus que le temps de vie des gouttes (la durée totale de l'évaporation) ne varie quasiment pas selon le choix fait pour ϵ_{sat}, ce qui est finalement l'information la plus importante que l'on souhaite tirer d'un modèle d'évaporation.

En conclusion, l'introduction d'un modèle d'évaporation "hybride" permet d'assurer de manière robuste la transition entre le modèle général, qui décrit un chauffage et un transfert de masse simultanés lorsque la température des gouttes est inférieure à la température de saturation, et le modèle d'ébullition, qui décrit le transfert de masse qui survient une fois que la goutte a atteint sa température de saturation, et que le flux de chauffage est nul.

E.3.5 Problématique de la fin d'évaporation

Une autre difficulté numérique liée à l'évaporation concerne le traitement de la fin de vie des gouttes. Dans le cadre de la méthode multi-classes et en utilisant un modèle du type "loi du D^2", la surface de la goutte suit une évolution linéaire de la forme suivante :

$$s(t) = at + b\,, \qquad \left\{ \begin{array}{rcccl} s(0) & = & s_0 & = & b \\ s(t_f) & = & 0 & = & at_f + s_0 \end{array} \right. \qquad \Longrightarrow \qquad s(t) = s_0\left(1 - \frac{t}{t_f}\right)\,, \tag{E.92}$$

où t_f est le temps de vie des gouttes. En terme de diamètre, puisque $s \propto d^2$, il vient

$$d^2(t) = d_0^2\left(1 - \frac{t}{t_f}\right) \qquad \Longrightarrow \qquad d(t) = d_0\sqrt{1 - \frac{t}{t_f}} \qquad \Longrightarrow \qquad d'(t) = \frac{-d_0}{2t_f\sqrt{1 - \frac{t}{t_f}}}\,, \tag{E.93}$$

et donc

$$\lim_{t \to t_f} d'(t) = -\infty\,. \tag{E.94}$$

Ainsi, en théorie, la dérivée première de la fonction $d(t)$ tend vers $-\infty$ en fin d'évaporation. Cette évolution, particulièrement raide, peut être captée numériquement de manière robuste, jusqu'à des diamètres d'autant plus faibles que le pas de temps de la simulation est bas. L'évolution du diamètre entre deux itérations numériques étant évidemment linéaire, pour un pas de temps donné (constant), vient un moment où le taux d'évaporation prédit par le modèle et intégré sur un pas de temps, conduit à une masse soit négative, soit positive, mais très proche de zéro (cf. Figure E.12).

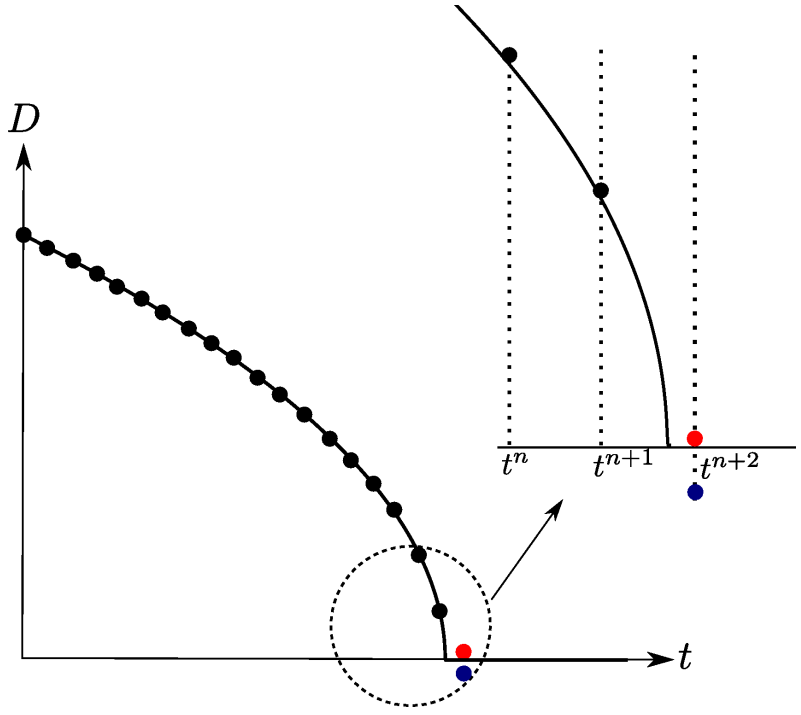


FIGURE E.12 – *Configuration numérique de la fin d'évaporation.*

Dans le premier cas, il suffit d'affecter l'état de "vide" à la cellule, c'est-à-dire lui affecter une masse nulle, et des vitesse et température égales à celles de la phase gazeuse. Il n'y a donc pas de problème de robustesse au niveau de SPIREE, mais il y a une perte de conservativité, puisque la masse envoyée vers la phase gazeuse est supérieure à la masse réellement enlevée de la phase liquide. De plus, il peut y avoir des problèmes de robustesse au niveau de CHARME dans le cas de forts chargements en gouttes, si les termes sources reçus sont vraiment trop importants, notamment en ce qui concerne l'énergie.

Dans le second cas, il peut apparaitre des problèmes si le schéma d'intégration temporelle est à plusieurs pas. Typiquement, avec le schéma RK2, l'avancement global du cycle est obtenu par une moyenne de l'avancement

de deux sous-cycles. En toute fin d'évaporation, des différences dans l'évolution des gouttes entre les deux sous-cycles conduisent à un avancement moyen incohérent. Par exemple, si le premier sous-cycle conduit à une masse positive mais très faible, et que le second sous-cycle conduit à vider la cellule, l'avancement moyen entre ces deux sous-cycles conduit à une cellule non vide, mais avec des propriétés aberrantes (diamètre, température...).

Pour tenter de préserver la robustesse dans ces deux cas de figure, le traitement réalisé dans SPIREE jusqu'à maintenant consistait à laisser à l'utilisateur le choix d'un paramètre d_{vide}, c'est-à-dire un diamètre en dessous duquel la goutte est supposée avoir disparu. Le calcul de l'évaporation était donc stoppé sous ce diamètre, et la masse restante était alors perdue. De plus, cette stratégie avait un autre défaut important : il était difficile voire impossible à l'utilisateur d'estimer la valeur minimale qui permettrait d'avoir un calcul globalement robuste. Aussi il lui fallait généralement faire plusieurs essais avec des valeurs différentes, avant que les calculs soient robustes. Enfin, on peut légitimement supposer que dans une simulation complexe, où des gouttes se trouvent dans un environnement gazeux aux propriétés très variables spatialement (composition, température, pression, vitesse), la dynamique de l'évaporation est également très variable. Par conséquent, la raideur de l'évaporation n'est pas la même partout, et il serait donc possible de décrire l'évaporation jusqu'à des diamètres plus bas dans les zones où le débit est moins fort. Or le paramètre d_{vide} étant global, le calcul de l'évaporation était stoppé partout au même diamètre.

Un nouveau traitement de la fin d'évaporation a donc été mis en place dans SPIREE, dans le cadre de la méthode multi-classes. Ce traitement, consiste, à chaque itération et pour chaque cellule de calcul, à :

- calculer le débit d'évaporation "limite", qui correspond au transfert de toute la masse de la goutte en un pas de temps :
$$\dot{m}_{lim} = \rho_0 \frac{\pi D^3}{6} \frac{1}{\Delta t} . \tag{E.95}$$
- comparer le débit d'évaporation $\dot{m}$ calculé par le modèle à ce débit limite :
  - si $\frac{\dot{m}}{\dot{m}_{lim}} < \epsilon_{lim}$, avec $\epsilon_{lim} < 1$, alors le calcul des termes sources est réalisé normalement, avec le débit et le flux de chauffage donnés par le modèle.
  - si $\frac{\dot{m}}{\dot{m}_{lim}} \geq \epsilon_{lim}$, alors on impose $\dot{m} = \dot{m}_{lim}$, et on ajoute une sécurité supplémentaire pour s'assurer que la cellule aura bien été vidée à la fin du cycle en temps global.
  - la valeur de ϵ_{lim} doit en théorie être au moins inférieure à 1. Néanmoins, comme expliqué précédemment, il faut éviter les cas où la dernière itération conduit à une masse non nulle, mais très proche de 0. La valeur de $\epsilon_{lim} = 0,4$ a donc été choisie, de manière à s'assurer que l'évaporation est stoppée au moins deux itérations avant la fin de vie des gouttes.

De cette manière, la masse restante est entièrement vidée et correctement transférée à la phase gazeuse, lorsque le pas de temps ne permet plus de décrire l'évolution de plus en plus rapide du diamètre. Il s'agit donc d'un traitement robuste et conservatif de la fin d'évaporation. En résumé, contrairement à la stratégie précédente, le nouveau traitement de la fin d'évaporation permet donc :

- d'avoir en quelque sorte un diamètre de coupure local, dynamique, et transparent pour l'utilisateur.
- le traitement est également censé être conservatif. Ce point n'est malheureusement assuré que dans le cadre des méthodes d'intégration temporelles de SPIREE à un seul pas (Euler explicite, et implicite). Avec un schéma RK2 par exemple, la stratégie d'intégration temporelle non splittée de CEDRE, à savoir des termes sources intégrés en même temps que les flux dans les cycles de chaque solveur, mais échangés entre solveurs uniquement en début de pas de temps, conduit toujours à une perte de la conservativité.

Il est à noter enfin que toute cette problématique de la fin de vie des gouttes est propre à la méthode "multi-classes", le traitement de l'évaporation dans le cadre de la méthode sectionnelle étant de nature fondamentalement différente.

E.4 Cas de validation

Les modèles d'évaporation de SPIREE précédemment décrits doivent répondre au double objectif suivant : être suffisament simples pour s'intégrer de manière efficace à la résolution des équations de SPIREE (et de CHARME), tout en offrant un niveau de précision acceptable pour les applications que l'on souhaite traiter. En ce qui concerne le premier point, nous avons vu que sous un certain nombre d'hypothèses simplificatices, il était possible d'aboutir à une description moyenne de "sous-maille" du processus d'évaporation, permettant de calculer de manière algébrique le débit d'évaporation et le flux de chaleur moyens par maille, et de les intégrer comme termes sources aux

équations de SPIREE et de CHARME. Néanmoins, les hypothèses faites négligent un certain nombre de phénomènes physiques se produisant au cours de l'évaporation d'une goutte. A titre d'exemple, les phénomènes suivants ne sont pas pris en compte :

- non sphéricité des gouttes et circulation interne engendrées par l'écoulement gazeux autour de la goutte.
- dissolution du gaz environnant dans les gouttes. En raison de ce phénomène, les gouttes sont chauffées jusqu'à une température maximale qui est légérèment inférieure à leur température d'ébullition.
- inhomogénéités de température des gouttes. En réalité, la chaleur est transférée de la surface vers l'intérieur de la goutte à une vitesse finie.
- effets de non idéalité du mélange gazeux, qui deviennent significatifs à haute pression. De même, les effets supercritiques ou transcritiques sur l'évaporation des gouttes ne sont pas considérés.
- effets de groupe. Les modèles décrivent l'évaporation d'une goutte isolée dans un mélange gazeux, sans prendre en compte l'effet d'éventuelles gouttes voisines. Or, pour de forts taux de chargement, le débit global d'évaporation est limité du fait que les gouttes s'évaporent à proximité les unes des autres.

Il est donc important de s'assurer que pour une configuration donnée représentative de nos simulations habituelles (vitesse, pression, température et composition du gaz, vitesse et taille des gouttes), le temps caractéristique du processus d'évaporation (le temps de vie des gouttes) est correctement prédit par les modèles disponibles. Pour cela, considérons le cas-test suivant, peu différent du cas utilisé en § E.3.3 : une goutte d'oxygène liquide au repos dans un environnement d'hydrogène gazeux à une température de 1000 K, et une pression de 10 atm. Le calcul peut être effectué sans le solveur CHARME, les propriétés du gaz étant figées. La mise en données de SPIREE est la suivante :

Gaz :
- $Y_{H_2} = 1$, $Y_{O_2} = 0$
- $P_\infty = 10$ atm $= 10.1325$ bar
- $T_\infty = 1000$ K
- $v_\infty = 0$

Particules :
- $T_p = 90$ K
- $D_p = 100\ \mu$m
- $v_p = 0$

Ce cas-test a fait l'objet de simulations numériques directes à l'échelle de la goutte dans LAFON et al. [163]. Comparons les résultats obtenus avec SPIREE aux résultats de référence de cette publication. La Figure E.13 représente les résultats obtenus avec le modèle hybride de SPIREE, les résultats de référence de LAFON et al. [163] y ont été reportés. Le temps de vie des gouttes ainsi calculé est donc précisément de 7.25 ms, tandis que les résultats de LAFON et al. [163] prédisent une durée de vie des gouttes de 8.4 ms. Au vu des nombreuses hypothèses effectuées pour établir le modèle d'évaporation de SPIREE, la précision obtenue est satisfaisante. Elle semble en tout cas bien suffisante pour pouvoir utiliser avec confiance ce modèle dans des simulations complexes.

E.5 Conclusion

Après avoir rappelé l'expression et l'origine des différents modèles d'évaporation disponibles dans SPIREE, les problèmes de robustesse habituellement rencontrés lors de leur utilisation ont été exposés. Il semble qu'ils soient d'origine double. Nous avons vu tout d'abord que le modèle général d'évaporation, qui décrit de manière simultanée le chauffage et l'évaporation des gouttes, devient instable dans des configurations d'ébullition de gouttes. Ce type de configuration est par exemple typique de la combustion LOx-GH_2, où les gouttes d'oxygène liquide sont chauffées très rapidement jusqu'à leur température de saturation. La solution proposée a consisté à développer un modèle hybride, dans lequel le flux de chauffage des gouttes est imposé nul lorsque celles-ci s'approchent suffisamment de la saturation, le débit d'évaporation étant calculé seulement à partir de la description des échanges de chaleur. La dynamique de l'évaporation est alors traitée de manière parfaitement robuste.

Le deuxième point sensible concernant la robustesse est lié au traitement de la fin d'évaporation, notamment dans le cadre de la méthode multi-classes avec des schémas temporels à plusieurs pas et une intégration temporelle globale. Ce point était jusqu'à maintenant traité dans SPIREE par l'intermédiaire d'un paramètre de coupure d_{vide}, définissant un diamètre au-dessous duquel le calcul de l'évaporation était stoppé, et la masse restante perdue. Par ailleurs, l'utilisateur devait déterminer lui-même une valeur suffisamment basse qui permette tout de même au calcul d'aboutir. Cette valeur étant globale, elle agissait partout de la même manière. Or, la dynamique de l'évaporation est généralement variable spatialement et temporellement dans une simulation complexe, puisque les propriétés du gaz le sont. Pour un pas de temps donné, il est donc possible a priori de décrire l'évaporation jusqu'à des diamètres plus réduits, lorsque la dynamique de l'évaporation est plus lente. Avec un paramètre de coupure

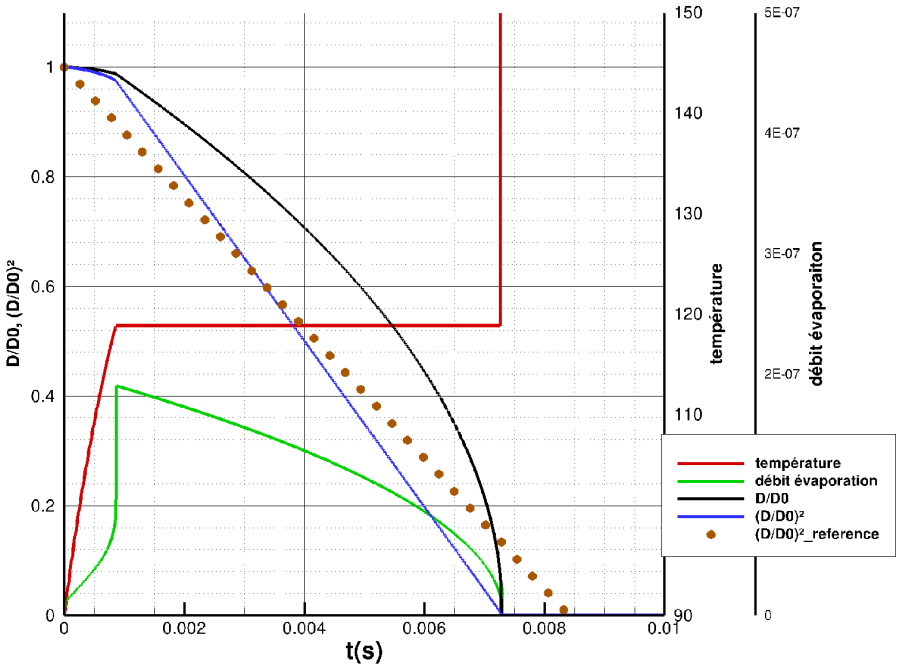


FIGURE E.13 – ***Résultats obtenus sur le cas-test de*** **LAFON** ***et al. [163].***

global, ceci était impossible. C'est pourquoi un nouveau traitement de la fin d'évaporation a été mis en place. Le paramètre de coupure est alors dynamique, il s'adapte à la raideur locale de l'évaporation, et il est transparent pour l'utilisateur. De plus, la conservation de la masse est assurée dans le cadre de schémas temporels à une étape.

Bibliographie

[1] Abgrall, R. Generalization of the Roe scheme for computing flows of mixed gases with variable concentrations. *La Recherche Aerospatiale(English Edition)* 6 (1988), 31–43 (cf. p. 291, 292).

[2] Abgrall, R. How to Prevent Pressure Oscillations in Multicomponent Flow Calculations : A Quasi Conservative Approach. *Journal of Computational Physics* 125:1 (1996), 150–160. doi : 10.1006/jcph.1996.0085 (cf. p. 291, 292).

[3] Abgrall, R. et S. Karni. Computations of Compressible Multifluids. *Journal of Computational Physics* 169:2 (2001), 594–623. doi : 10.1006/jcph.2000.6685 (cf. p. 107, 291, 293).

[4] Abgrall, R. et R. Saurel. Discrete equations for physical and numerical compressible multiphase mixtures. *Journal of Computational Physics* 186:2 (2003), 361–396. doi : 10.1016/S0021-9991(03)00011-1 (cf. p. 44).

[5] Abramzon, B. et W. Sirignano. Droplet vaporization model for spray combustion calculations. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 32:9 (1989), 1605–1618. doi : 10.1016/0017-9310(89)90043-4 (cf. p. 120, 317, 323).

[6] Anderson, W. E. et V. Yang. *Liquid Rocket Engine Combustion Instability*. Washington DC : American Institute of Aeronautics et Astronautics, 1995 (cf. p. 21).

[7] Apte, S., M. Gorokhovski et P. Moin. LES of atomizing spray with stochastic modeling of secondary breakup. *International Journal of Multiphase Flow* 29:9 (2003), 1503–1522. doi : 10.1016/S0301-9322(03)00111-3 (cf. p. 56).

[8] Arienti, M., X. Li, M. C. Soteriou, C. A. Eckett, M. Sussman et R. J. Jensen. Coupled Level-Set/Volume-of-Fluid Method for Simulation of Injector Atomization. *Journal of Propulsion and Power* 29:1 (2013), 147–157. doi : 10.2514/1.B34198 (cf. p. 70).

[9] Arora, M. et P. L. Roe. A Well-Behaved TVD Limiter for High-Resolution Calculations of Unsteady Flow. *Journal of Computational Physics* 132:1 (1997), 3–11. doi : 10.1006/jcph.1996.5514 (cf. p. 170).

[10] Aspden, A., N. Nikiforakis, S. Dalziel et J. Bell. Analysis of implicit LES methods. *Communications in Applied Mathematics and Computational Science* 3:1 (2008), 103–126. doi : 10.2140/camcos.2008.3.103 (cf. p. 95).

[11] Baer, M. R. et J. W. Nunziato. A Two-phase Mixture Theory for the Deflagration-to-Detonation Transition (DDT) in Reactive Granular Materials. *Journal of Multiphase flows* 12 (1986), 861–889 (cf. p. 48, 293).

[12] Bailly, C. et G. Comte-Bellot. *Turbulence*. Paris : CNRS editions, 2003 (cf. p. 88).

[13] Bardina, J., J. Ferziger et W. Reynolds. Improved subgrid-scale models for large-eddy simulation. *13th Fluid and PlasmaDynamics Conference*. Fluid Dynamics and Co-located Conferences. American Institute of Aeronautics et Astronautics, 1980 (cf. p. 43).

[14] Barth, T. et M. Ohlberger. Finite Volume Methods : Foundation and Analysis. *Encyclopedia of Computational Mechanics, Volume 1, Fundamentals*. John Wiley et Sons Ltd, 2004, 439–474 (cf. p. 144, 157).

[15] Batchelor, G. K. *The theory of homogeneous turbulence*. Cambridge science classics. Cambridge ; New York : Cambridge University Press, 1982 (cf. p. 88).

[16] Baumgarten, C. *Mixture formation in internal combustion engines*. Heat and mass transfer. Berlin ; New York : Springer, 2006 (cf. p. 28).

[17] Bazdidi-Tehrani, F., A. Ghafouri et M. Jadidi. Grid resolution assessment in large eddy simulation of dispersion around an isolated cubic building. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics* 121 (2013), 1–15. doi : 10.1016/j.jweia.2013.07.003 (cf. p. 94).

[18] Beau, P. A. Modélisation de l'atomisation d'un jet liquide. Application aux sprays Diesel. Thèse de doct. Université de Rouen, 2006 (cf. p. 54, 70).

[19] Berger, M., M. J. Aftosmis et S. M. Murman. Analysis of slope limiters on irregular grids. *AIAA paper* 490 (2005), 1–22 (cf. p. 145, 170).

[20] Berthon, C. Numerical approximations of the 10-moment Gaussian closure. *Mathematics of Computation* 75:256 (2006), 1809–1831. doi : 10.1090/S0025-5718-06-01860-6 (cf. p. 62).

[21] Bertier, N. Simulation des grandes échelles en aérothermique sur des maillages non-structurés généraux. Thèse de doct. 2006 (cf. p. 150).

[22] Bianchi, G. M., F. Minelli, R. Scardovelli et S. Zaleski. *3D Large Scale Simulation of the High-Speed Liquid Jet Atomization*. Rap. tech. 2007-01-0244. Warrendale, PA : SAE International, 2007 (cf. p. 43).

[23] Billet, G. et R. Abgrall. An adaptive shock-capturing algorithm for solving unsteady reactive flows. *Computers & Fluids* 32:10 (2003), 1473–1495. doi : 10.1016/S0045-7930(03)00004-5 (cf. p. 293).

[24] Bonnefoy, O. *Cours de Thermodynamique - Ecole Nationale Supérieure des Mines de Saint-Etienne*. 2014 (cf. p. 99).

[25] Borghi, R. *Modélisation et théorie des flammes*. Paris : Technip, 2000 (cf. p. 128).

[26] Bouchut, F., S. Jin et X. Li. Numerical Approximations of Pressureless and Isothermal Gas Dynamics. *SIAM Journal on Numerical Analysis* 41:1 (2003), 135–158. doi : 10.1137/S0036142901398040 (cf. p. 61, 141, 142, 188).

[27] Boudier, G., L. Gicquel et T. Poinsot. Effects of mesh resolution on large eddy simulation of reacting flows in complex geometry combustors. *Combustion and Flame* 155:1-2 (2008), 196–214. doi : 10.1016/j.combustflame.2008.04.013 (cf. p. 94).

[28] Brackbill, J., D. Kothe et C Zemach. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics* 100:2 (1992), 335–354. doi : 10.1016/0021-9991(92)90240-Y (cf. p. 42, 83).

[29] Buffard, T. et S. Clain. Monoslope and multislope MUSCL methods for unstructured meshes. *Journal of Computational Physics* 229:10 (2010), 3745–3776. doi : 10.1016/j.jcp.2010.01.026 (cf. p. 145, 157, 160, 182–184).

[30] Buffard, T., T. Gallouët et J.-M. Hérard. A sequel to a rough Godunov scheme : application to real gases. *Computers & Fluids* 29:7 (2000), 813–847. doi : 10.1016/S0045-7930(99)00026-2 (cf. p. 137).

[31] Butcher, J. C. *Numerical methods for ordinary differential equations*. 2nd ed. Chichester, England ; Hoboken, NJ : Wiley, 2008 (cf. p. 147, 148).

[32] Butcher, J. C. *The numerical analysis of ordinary differential equations : Runge-Kutta and general linear methods*. Chichester ; New York : J. Wiley, 1987 (cf. p. 147, 148).

[33] Butcher, J. Numerical methods for ordinary differential equations in the 20th century. *Journal of Computational and Applied Mathematics* 125:1-2 (2000), 1–29. doi : 10.1016/S0377-0427(00)00455-6 (cf. p. 147, 148).

[34] Calgaro, C., E. Chane-Kane, E. Creusé et T. Goudon. L∞-stability of vertex-based MUSCL finite volume schemes on unstructured grids : Simulation of incompressible flows with high density ratios. *Journal of Computational Physics* 229:17 (2010), 6027–6046. doi : 10.1016/j.jcp.2010.04.034 (cf. p. 157).

[35] Caré, I. et M. Ledoux. Study of an Airblast Coaxial Atomizer, Experiments and Modelisation. *ICLASS-91*. Gaithersburg, MD, USA, 1991 (cf. p. 34).

[36] Celik, I. B., Z. N. Cehreli et I. Yavuz. Index of Resolution Quality for Large Eddy Simulations. *Journal of Fluids Engineering* 127:5 (2005), 949. doi : 10.1115/1.1990201 (cf. p. 94).

[37] Chandrasekhar, S. *Hydrodynamic and hydromagnetic stability*. Dover ed. New York : Dover Publications, 1981 (cf. p. 33).

[38] Chargy, D., R. Abgrall, F. Fezoui Loula et B. Larrouturou. *Comparisons of several upwind schemes for multi-component one-dimensional inviscid flows*. Rapport de recherche RR-1253. INRIA, 1990 (cf. p. 293, 301).

[39] Chen, G.-Q., C. D. Levermore et T.-P. Liu. Hyperbolic conservation laws with stiff relaxation terms and entropy. *Communications on Pure and Applied Mathematics* 47:6 (1994), 787–830. doi : 10.1002/cpa.3160470602 (cf. p. 49).

[40] Chesnel, J., J. Reveillon, T. Menard et F.-X. Demoulin. Large eddy simulation of liquid jet atomization. *Atomization and Sprays* 21:9 (2011), 711–736. doi : 10.1615/AtomizSpr.2012003740 (cf. p. 43, 54, 257).

[41] Chesnel, J., T. Menard, J. Reveillon et F.-X. Demoulin. Subgrid analysis of liquid jet atomization. *Atomization and Sprays* 21:1 (2011), 41–67. doi : 10.1615/AtomizSpr.v21.i1.40 (cf. p. 43, 95, 257).

[42] Chesnel, J. Simulation aux Grandes Échelles de l'Atomisation. Application à l'Injection Automobile. Thèse de doct. Université de Rouen, 2010 (cf. p. 28, 42, 43, 54, 257).

[43] Chigier, N. et Z. Farago. Morphological classification of disintegration of round liquid jets in a coaxial air stream. *Atomization and Sprays* 2:2 (1992), 137–153 (cf. p. 29–31).

[44] Clain, S., S. Diot et R. Loubère. A high-order finite volume method for systems of conservation laws—Multi-dimensional Optimal Order Detection (MOOD). *Journal of Computational Physics* 230:10 (2011), 4028–4050. doi : 10.1016/j.jcp.2011.02.026 (cf. p. 189).
[45] Clain, S. et V. Clauzon. L∞ stability of the MUSCL methods. *Numerische Mathematik* 116:1 (2010), 31–64. doi : 10.1007/s00211-010-0299-2 (cf. p. 160).
[46] Clauzon, V. Analyse de schémas d'ordre élevé pour les écoulements compressibles. {Application} à la simulation numérique d'une torche à plasma. Thèse de doct. Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand, 2008 (cf. p. 157, 160, 165, 166).
[47] Colella, P. Multidimensional upwind methods for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics* 87:1 (1990), 171–200. doi : 10.1016/0021-9991(90)90233-Q (cf. p. 157).
[48] Coquel, F., T. Gallouët, J.-M. Hérard et N. Seguin. Closure laws for a two-fluid two-pressure model. *Comptes Rendus Mathematique* 334:10 (2002), 927–932. doi : 10.1016/S1631-073X(02)02366-X (cf. p. 48).
[49] Courbet, B., C. Benoit, V. Couaillier, F. Haider, M. C. Le Pape et S. Péron. Space Discretization Methods. *AerospaceLab Journal* 2 (2011), 66–79 (cf. p. 133, 158).
[50] Cournède, P.-H., C. Debiez et A. Dervieux. *A Positive MUSCL Scheme for Triangulations*. Rap. tech. RR-3465. INRIA, 1998 (cf. p. 157).
[51] Crowe, C. T., T. R. Troutt et J. N. Chung. Numerical Models for Two-Phase Turbulent Flows. *Annual Review of Fluid Mechanics* 28:1 (1996), 11–43. doi : 10.1146/annurev.fl.28.010196.000303 (cf. p. 47).
[52] Culick, F. E. et V. Yang. Overview of combustion instabilities in liquid-propellant rocket engines. *Liquid rocket engine combustion instability* 169 (1995), 3–37 (cf. p. 21).
[53] Davidson, L. Large Eddy Simulations : How to evaluate resolution. *International Journal of Heat and Fluid Flow* 30:5 (2009), 1016–1025. doi : 10.1016/j.ijheatfluidflow.2009.06.006 (cf. p. 94).
[54] Davis, S. F. Simplified Second-Order Godunov-Type Methods. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* 9:3 (1988), 445–473. doi : 10.1137/0909030 (cf. p. 139).
[55] De Chaisemartin, S. Modèles eulériens et simulation numérique de la dispersion turbulente de brouillards qui s'évaporent. Thèse de doct. Ecole Centrale Paris, 2009 (cf. p. 62).
[56] De Villiers, E., A. Gosman et H. Weller. *Large Eddy Simulation of Primary Diesel Spray Atomization*. Rap. tech. 2004-01-0100. Warrendale, PA : SAE International, 2004 (cf. p. 43).
[57] Delhaye, J. Jump conditions and entropy sources in two-phase systems. Local instant formulation. *International Journal of Multiphase Flow* 1:3 (1974), 395–409. doi : 10.1016/0301-9322(74)90012-3 (cf. p. 44).
[58] Demoulin, F.-X., P.-A. Beau, G. Blokkeel, A. Mura et R. Borghi. A new model for turbulent flows with large density fluctuations : application to liquid atomization. *Atomization and Sprays* 17:4 (2007), 315–345. doi : 10.1615/AtomizSpr.v17.i4.20 (cf. p. 54).
[59] Demoulin, F.-X., J. Reveillon, B. Duret, Z. Bouali, P. Desjonqueres et T. Menard. Toward using direct numerical simulation to improve primary break-up modeling. *Atomization and Sprays* 23:11 (2013), 957–980. doi : 10.1615/AtomizSpr.2013007439 (cf. p. 54).
[60] Descombes, S. et M. Massot. Operator splitting for nonlinear reaction-diffusion systems with an entropic structure : singular perturbation and order reduction. *Numerische Mathematik* 97:4 (2004), 667–698. doi : 10.1007/s00211-003-0496-3 (cf. p. 147).
[61] Desjardins, O., R. Fox et P. Villedieu. A quadrature-based moment method for dilute fluid-particle flows. *Journal of Computational Physics* 227:4 (2008), 2514–2539. doi : 10.1016/j.jcp.2007.10.026 (cf. p. 58).
[62] Desjardins, O., V. Moureau et H. Pitsch. An accurate conservative level set/ghost fluid method for simulating turbulent atomization. *Journal of Computational Physics* 227:18 (2008), 8395–8416. doi : 10.1016/j.jcp.2008.05.027 (cf. p. 42).
[63] Desjardins, O., J. McCaslin, M. Owkes et P. Brady. Direct numerical and large-eddy simulation of primary atomization in complex geometries. *Atomization and Sprays* 23:11 (2013), 1001–1048. doi : 10.1615/AtomizSpr.2013007679 (cf. p. 43).
[64] Després, B. *Systèmes hyperboliques de lois de conservation : application à la dynamique des gaz*. Mathématiques appliquées. Palaiseau : [Paris] : Ecole polytechnique ; Diffusion, Ellipses, 2005 (cf. p. 135).
[65] Diot, S. La méthode MOOD - Multi-dimensional Optimal Order Detection - la première approche a posteriori aux méthodes volumes finis d'ordre très élevé. Thèse de doct. Université Paul Sabatier Toulouse III, 2012 (cf. p. 189).
[66] Diot, S., S. Clain et R. Loubère. Improved detection criteria for the Multi-dimensional Optimal Order Detection (MOOD) on unstructured meshes with very high-order polynomials. *Computers & Fluids* 64 (2012), 43–63. doi : 10.1016/j.compfluid.2012.05.004 (cf. p. 189).

[67] Diot, S., M. M. François et E. D. Dendy. A higher-order unsplit 2D direct Eulerian finite volume method for two-material compressible flows based on the MOOD paradigms. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 76:12 (2014), 1064–1087. doi : 10.1002/fld.3966 (cf. p. 189).

[68] Diot, S., R. Loubère et S. Clain. The Multidimensional Optimal Order Detection method in the three-dimensional case : very high-order finite volume method for hyperbolic systems. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 73:4 (2013), 362–392. doi : 10.1002/fld.3804 (cf. p. 189).

[69] Doisneau, F., F. Laurent, A. Murrone, J. Dupays et M. Massot. Eulerian multi-fluid models for the simulation of dynamics and coalescence of particles in solid propellant combustion. *Journal of Computational Physics* 234 (2013), 230–262. doi : 10.1016/j.jcp.2012.09.025 (cf. p. 111).

[70] Doisneau, F., A. Sibra, J. Dupays, A. Murrone, F. Laurent et M. Massot. Numerical Strategy for Unsteady Two-Way Coupled Polydisperse Sprays : Application to Solid-Rocket Instabilities. *Journal of Propulsion and Power* 30:3 (2014), 727–748. doi : 10.2514/1.B34862 (cf. p. 146).

[71] Doisneau, F. Eulerian modeling and simulation of polydisperse moderately dense coalescing spray flows with nanometric-to-inertial droplets : application to Solid Rocket Motors. Thèse de doct. Ecole Centrale Paris, 2013 (cf. p. 58, 62, 69, 111, 146, 284).

[72] Dos Santos, F. et L. Le Moyne. Spray Atomization Models in Engine Applications, from Correlations to Direct Numerical Simulations. *Oil & Gas Science and Technology – Revue d'IFP Energies nouvelles* 66:5 (2011), 801–822. doi : 10.2516/ogst/2011116 (cf. p. 58).

[73] Drew, D. A. Mathematical Modeling of Two-Phase Flow. *Annual Review of Fluid Mechanics* 15:1 (1983), 261–291. doi : 10.1146/annurev.fl.15.010183.001401 (cf. p. 47, 51).

[74] Drew, D. A. *Theory of multicomponent fluids*. Applied mathematical sciences 135. New York : Springer, 1999 (cf. p. 44, 45).

[75] Duarte, M. Adaptive numerical methods in time and space for the simulation of multi-scale reaction fronts. Theses. Ecole Centrale Paris, 2011 (cf. p. 147).

[76] Dubief, Y. et F. Delcayre. On coherent-vortex identification in turbulence. *Journal of Turbulence* 1 (2000), N11. doi : 10.1088/1468-5248/1/1/011 (cf. p. 194).

[77] Dufour, G. Modélisation multi-fluide eulérienne pour les écoulements diphasiques à inclusions dispersees. Thèse de doct. Université Paul Sabatier Toulouse III, 2005 (cf. p. 67, 69, 122, 125, 126, 284).

[78] Dufour, G. et P. Villedieu. A second-order multi-fluid model for evaporating sprays. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis* 39:5 (2005), 931–963. doi : 10.1051/m2an:2005041 (cf. p. 67, 284).

[79] Dukowicz, J. K. A particle-fluid numerical model for liquid sprays. *Journal of Computational Physics* 35:2 (1980), 229–253. doi : 10.1016/0021-9991(80)90087-X (cf. p. 56).

[80] Dupif, V. *Contribution to the design of a two-phase flow eulerian model polydisperse in velocity*. Rapport de stage. ONERA, 2014 (cf. p. 63).

[81] Duret, B., J. Reveillon, T. Menard et F. Demoulin. Improving primary atomization modeling through DNS of two-phase flows. *International Journal of Multiphase Flow* 55 (2013), 130–137. doi : 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2013.05.004 (cf. p. 54).

[82] Dutoya, D. et L. Matuszewski. Thermodynamics in CEDRE. *AerospaceLab Journal* Issue 2 (2011) (cf. p. 99).

[83] Eggers, J. et E. Villermaux. Physics of liquid jets. *Reports on Progress in Physics* 71:3 (2008), 036601. doi : 10.1088/0034-4885/71/3/036601 (cf. p. 25).

[84] Einfeldt, B. On Godunov-Type Methods for Gas Dynamics. *SIAM Journal on Numerical Analysis* 25:2 (1988), 294–318. doi : 10.1137/0725021 (cf. p. 137, 139).

[85] Elkotb, M. Fuel atomization for spray modelling. *Progress in Energy and Combustion Science* 8:1 (1982), 61–91. doi : 10.1016/0360-1285(82)90009-0 (cf. p. 58).

[86] Emery, A. F. An evaluation of several differencing methods for inviscid fluid flow problems. *Journal of Computational Physics* 2:3 (1968), 306–331. doi : 10.1016/0021-9991(68)90060-0 (cf. p. 182).

[87] Emre, O. Modeling of spray polydispersion with two-way turbulent interactions for high pressure direct injection in engines. Thèse de doct. Ecole Centrale Paris, 2014 (cf. p. 47, 58, 67).

[88] Engelbert, C., Y. Hardalupas et J. H. Whitelaw. Breakup Phenomena in Coaxial Airblast Atomizers. *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 451:1941 (1995), 189–229. doi : 10.1098/rspa.1995.0123 (cf. p. 34).

[89] Eroglu, H., N. Chigier et Z. Farago. Coaxial atomizer liquid intact lengths. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics* 3:2 (1991), 303. doi : 10.1063/1.858139 (cf. p. 33).

[90] Faeth, G. Structure and atomization properties of dense turbulent sprays. *Symposium (International) on Combustion* 23:1 (1991), 1345–1352. doi : 10.1016/S0082-0784(06)80399-1 (cf. p. 26–28).

[91] Faeth, G., L.-P Hsiang et P.-K Wu. Structure and breakup properties of sprays. *International Journal of Multiphase Flow* 21 (1995), 99–127. doi : 10.1016/0301-9322(95)00059-7 (cf. p. 26, 28).

[92] Favre, A. Formulation of the Statistical Equations of Turbulent Flows with Variable Density. *Studies in Turbulence*. Sous la dir. de Gatski, T., C. Speziale et S. Sarkar. Springer New York, 1992, 324–341 (cf. p. 90).
[93] Fdida, N. Développement d'un système de granulométrie par imagerie : application aux sprays larges et hétérogènes. Thèse de doct. Université de Rouen, 2008 (cf. p. 18).
[94] Fdida, N. et J.-B. Blaisot. Drop size distribution measured by imaging : determination of the measurement volume by the calibration of the point spread function. *Measurement Science and Technology* 21:2 (2010), 025501. doi : 10.1088/0957-0233/21/2/025501 (cf. p. 18).
[95] Fdida, N., L. Vingert et A. Ristori. *Expérience de validation SEQUOIA : granulométrie et vélocimétrie par imagerie haute cadence sur le banc Mascotte*. Rapport technique RT 1/22149. ONERA/DEFA, 2013 (cf. p. 18, 227, 253).
[96] Fdida, N., J.-B. Blaisot, A. Floch et D. Dechaume. Drop-size measurement techniques applied to gasoline sprays. *Atomization and Sprays* 20:2 (2010), 141–162. doi : 10.1615/AtomizSpr.v20.i2.40 (cf. p. 18).
[97] Fedkiw, R. P., T. Aslam, B. Merriman et S. Osher. A Non-oscillatory Eulerian Approach to Interfaces in Multimaterial Flows (the Ghost Fluid Method). *Journal of Computational Physics* 152:2 (1999), 457–492. doi : 10.1006/jcph.1999.6236 (cf. p. 42, 292).
[98] Février, P., O. Simonin et K. D. Squires. Partitioning of particle velocities in gas–solid turbulent flows into a continuous field and a spatially uncorrelated random distribution : theoretical formalism and numerical study. *Journal of Fluid Mechanics* 533 (2005). doi : 10.1017/S0022112005004088 (cf. p. 47).
[99] Fox, R., F. Laurent et M. Massot. Numerical simulation of spray coalescence in an Eulerian framework : Direct quadrature method of moments and multi-fluid method. *Journal of Computational Physics* 227:6 (2008), 3058–3088. doi : 10.1016/j.jcp.2007.10.028 (cf. p. 58).
[100] Fox, R. O. Large-Eddy-Simulation Tools for Multiphase Flows. *Annual Review of Fluid Mechanics* 44:1 (2012), 47–76. doi : 10.1146/annurev-fluid-120710-101118 (cf. p. 58).
[101] Fureby, C. et F. F. Grinstein. Large Eddy Simulation of High-Reynolds-Number Free and Wall-Bounded Flows. *Journal of Computational Physics* 181:1 (2002), 68–97. doi : 10.1006/jcph.2002.7119 (cf. p. 95).
[102] Gallouët, T., J.-M. Hérard et N. Seguin. Numerical Modeling of Two-Phase Flows Using the Two-Fluid Two-Pressure Approach. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences* 14:05 (2004), 663–700. doi : 10.1142/S0218202504003404 (cf. p. 48).
[103] Garnier, E. *Large eddy simulation for compressible flows*. Scientific computation. Dordrecht ; London : Springer, 2009 (cf. p. 43, 94, 95).
[104] Gaskell, D. R. *Introduction to the thermodynamics of materials*. 5th ed. New York : Taylor & Francis, 2008 (cf. p. 98).
[105] Gear, C. W. *Numerical initial value problems in ordinary differential equations*. Prentice-Hall series in automatic computation. Englewood Cliffs, N.J : Prentice-Hall, 1971 (cf. p. 150).
[106] Gicquel, P., E. Porcheron et E. Brisson. *Caractérisation expérimentale en combustion d'un brouillard LOX-GH2 issu d'un injecteur coaxial (campagne d'essais 1997 à 1 MPa)*. Rapport technique RT 98/6128. 1998 (cf. p. 197, 227, 243–245).
[107] Godlewski, E. et P.-A. Raviart. *Numerical Approximation of Hyperbolic Systems of Conservation Laws*. New York, NY : Springer, 1996 (cf. p. 135, 157, 159).
[108] Godunov, S. K. A difference method for numerical calculation of discontinuous solutions of the equations of hydrodynamics. *Matematicheskii Sbornik* 89:3 (1959), 271–306 (cf. p. 135, 137, 157).
[109] Goncalvès Da Silva, E. Résolution numérique des équations d'Euler 1D. Institut Polytechnique de Grenoble, 2008 (cf. p. 137).
[110] Goodman, J. B. et R. J. LeVeque. On the Accuracy of Stable Schemes for {2D} Scalar Conservation Laws. *Mathematics of Computation* 45:171 (1985), 15. doi : 10.2307/2008046 (cf. p. 157).
[111] Gordon, S. et B. McBride. *Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions, rocket performance, incident and reflected shocks, and Chapman-Jouguet detonations*. NASA SP. Scientific, Technical Information Office, National Aeronautics et Space Administration ; [for sale by the National Technical Information Service, Springfield, Va.], 1971 (cf. p. 130).
[112] Gorokhovski, M. A. et V. L. Saveliev. Analyses of Kolmogorov's model of breakup and its application into Lagrangian computation of liquid sprays under air-blast atomization. *Physics of Fluids* 15:1 (2003), 184. doi : 10.1063/1.1527914 (cf. p. 56, 57).
[113] Gorokhovski, M. The Stochastic Lagrangian Model of Drop Breakup in the Computation of Liquid Sprays. *Atomization and Sprays* 11:5 (2001), 15. doi : 10.1615/AtomizSpr.v11.i5.20 (cf. p. 56).
[114] Gorokhovski, M. et M. Herrmann. Modeling Primary Atomization. *Annual Review of Fluid Mechanics* 40:1 (2008), 343–366. doi : 10.1146/annurev.fluid.40.111406.102200 (cf. p. 57).

[115] Greenberg, J., I. Silverman et Y. Tambour. On the origins of spray sectional conservation equations. *Combustion and Flame* 93:1-2 (1993), 90–96. doi : 10.1016/0010-2180(93)90085-H (cf. p. 66).

[116] Grinstein, F. F., L. G. Margolin et W. Rider. *Implicit large eddy simulation : computing turbulent fluid dynamics*. Cambridge : Cambridge University Press, 2010 (cf. p. 95).

[117] Grospellier, G. et B. Lelandais. The {Arcane} development framework. ACM Press, 2009, 1–11. doi : 10.1145/1595655.1595659 (cf. p. 158).

[118] Guelfi, A., D. Bestion, M. Boucker, P. Boudier, P. Fillion, M. Grandotto, J.-M. Hérard, E. Hervieu et P. Péturaud. NEPTUNE : A New Software Platform for Advanced Nuclear Thermal Hydraulics. *Nuclear Science and Engineering* 156:3 (2007), 281–324. doi : 10.13182/NSE05-98 (cf. p. 47).

[119] Gueyffier, D., J. Li, A. Nadim, R. Scardovelli et S. Zaleski. Volume-of-Fluid Interface Tracking with Smoothed Surface Stress Methods for Three-Dimensional Flows. *Journal of Computational Physics* 152:2 (1999), 423–456. doi : 10.1006/jcph.1998.6168 (cf. p. 41).

[120] Guillard, H. On the behavior of upwind schemes in the low Mach number limit. IV : P0 approximation on triangular and tetrahedral cells. *Computers & Fluids* 38:10 (2009), 1969–1972. doi : 10.1016/j.compfluid.2009.06.003 (cf. p. 140).

[121] Guillard, H. Recent developments in the computation of compressible low Mach number flows. *Flow, Turbulence and Combustion* 76:4 (2006), 363–369. doi : 10.1007/s10494-006-9024-8 (cf. p. 140).

[122] Guillard, H. et A. Murrone. On the behavior of upwind schemes in the low Mach number limit : II. Godunov type schemes. *Computers & Fluids* 33:4 (2004), 655–675. doi : 10.1016/j.compfluid.2003.07.001 (cf. p. 140).

[123] Guillard, H. et C. Viozat. On the behaviour of upwind schemes in the low Mach number limit. *Computers & Fluids* 28:1 (1999), 63–86. doi : 10.1016/S0045-7930(98)00017-6 (cf. p. 140).

[124] Habiballah, M., L. Vingert, J. C. Traineau et P. Vuillermoz. MASCOTTE : a test bench for cryogenic combustion research. *47th International Astronautical Congress*. Beijing, China, 1997 (cf. p. 2, 18).

[125] Hadamard, J. *Lectures on Cauchy's problem in linear partial differential equations*. Dover phoenix editions. Mineola, N.Y : Dover Publications, 2003 (cf. p. 48).

[126] Haider, F. *PRF Mogadir : Schémas volumes finis d'ordre élevé pour CEDRE.* Rapport technique RT 5/14450. ONERA, 2010 (cf. p. 189).

[127] Haider, F., P. Brenner, B. Courbet et J. Croisille. An Efficient Algorithm for Parallel k-exact Finite Volume Reconstruction on Unstructured Grids. VIENNE, 2012 (cf. p. 189).

[128] Haider, F., N. Bertier, B. Courbet, F. Vuillot et J. Croisille. Application of a High Order Finite Volume Scheme on Unstructured Grids to Fluid Dynamics and Aerothermochemistry. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* (2014), 1–32 (cf. p. 189).

[129] Haider, F., P. Brenner, B. Courbet et J. Croisille. Applications of Efficient Parallel k-Exact Finite Volume Reconstruction on Unstructured Grids. BARCELONE, 2014 (cf. p. 189).

[130] Haider, F. Discretization on general unstructured grids and applications on LES. Thèse de doct. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2009 (cf. p. 145, 174, 189).

[131] Haider, F., P. Brenner, B. Courbet et J.-P. Croisille. Parallel Implementation of k-Exact Finite Volume Reconstruction on Unstructured Grids. *High Order Nonlinear Numerical Schemes for Evolutionary PDEs*. T. 99. Cham : Springer International Publishing, 2014, 59–75 (cf. p. 189).

[132] Harten, A. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics* 49:3 (1983), 357–393. doi : 10.1016/0021-9991(83)90136-5 (cf. p. 157, 171).

[133] Harten, A., B. Engquist, S. Osher et S. R. Chakravarthy. Uniformly high order accurate essentially non-oscillatory schemes, III. *Journal of Computational Physics* 71:2 (1987), 231–303. doi : 10.1016/0021-9991(87)90031-3 (cf. p. 137).

[134] Harten, A., P. D. Lax et B. van Leer. On Upstream Differencing and {Godunov}-type Schemes for Hyperbolic Conservation Laws. *SIAM Review* 25:1 (1983), 35–61. doi : 10.1137/1025002 (cf. p. 137, 138, 183).

[135] Herrmann, M. A balanced force refined level set grid method for two-phase flows on unstructured flow solver grids. *Journal of Computational Physics* 227:4 (2008), 2674–2706. doi : 10.1016/j.jcp.2007.11.002 (cf. p. 70).

[136] Herrmann, M. A parallel Eulerian interface tracking/Lagrangian point particle multi-scale coupling procedure. *Journal of Computational Physics* 229:3 (2010), 745–759. doi : 10.1016/j.jcp.2009.10.009 (cf. p. 70).

[137] Herrmann, M. Detailed Numerical Simulations of the Primary Atomization of a Turbulent Liquid Jet in Crossflow. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 132:6 (2010), 061506. doi : 10.1115/1.4000148 (cf. p. 70).

[138] Hiroyasu, H. et M. Arai. *Structures of Fuel Sprays in Diesel Engines*. Rap. tech. 900475. Warrendale, PA : SAE International, 1990 (cf. p. 58).

[139] Hirt, C. et B. Nichols. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics* 39:1 (1981), 201–225. doi : 10.1016/0021-9991(81)90145-5 (cf. p. 41, 292).
[140] Hopfinger, E. J. et J. C. Lasheras. Breakup of a Water Jet in High Velocity Co-Flowing Air. *6th ICLASS Conference*. Rouen, 1994 (cf. p. 30, 31).
[141] Hsiang, L.-P. et G. Faeth. Drop properties after secondary breakup. *International Journal of Multiphase Flow* 19:5 (1993), 721–735. doi : 10.1016/0301-9322(93)90039-W (cf. p. 126).
[142] Hubbard, M. Multidimensional Slope Limiters for MUSCL-type Finite Volume Schemes on Unstructured Grids. *Journal of Computational Physics* 155:1 (1999), 54–74. doi : 10.1006/jcph.1999.6329 (cf. p. 145, 157).
[143] Hunt, J. C. R., A. A. Wray et P. Moin. Eddies, streams, and convergence zones in turbulent flows. *Studying Turbulence Using Numerical Simulation Databases, 2*. 1988, 193–208 (cf. p. 194).
[144] Ishii, M. *Thermo-fluid dynamics of two-phase flow*. 2nd ed. New York : Springer, 2011 (cf. p. 20, 44, 45, 47, 51).
[145] Ishii, M., S. Kim et J. Uhle. Interfacial area transport equation : model development and benchmark experiments. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 45:15 (2002), 3111–3123. doi : 10.1016/S0017-9310(02)00041-8 (cf. p. 51).
[146] Jameson, A. Analysis and Design of Numerical Schemes for Gas Dynamics 1 {Artificial} Diffusion, Upwind Biasing, Limiters and Their Effect on Accuracy and Multigrid Convergence. *International Journal of Computational Fluid Dynamics* 4 (1995), 171–218 (cf. p. 157).
[147] Jameson, A., W. Schmidt et E. Turkel. Numerical solutions of the Euler equations by finite volume methods using Runge-Kutta time-stepping schemes. *AIAA paper* 1259 (1981) (cf. p. 137).
[148] Jay, S. Modélisation de la combustion diphasique au moyen de bilans d'aire interfaciale et de surface de flamme. Application à la combustion cryotechnique. Thèse de doct. Ecole Centrale Paris, 2003 (cf. p. 53, 258).
[149] Jay, S, F Lacas et S Candel. Combined surface density concepts for dense spray combustion. *Combustion and Flame* 144:3 (2006), 558–577. doi : 10.1016/j.combustflame.2005.07.017 (cf. p. 3, 53, 54, 200).
[150] Jenny, P., B. Müller et H. Thomann. Correction of Conservative Euler Solvers for Gas Mixtures. *Journal of Computational Physics* 132:1 (1997), 91–107. doi : 10.1006/jcph.1996.5625 (cf. p. 291, 293, 301).
[151] Jiang, G.-S. et C.-W. Shu. Efficient Implementation of Weighted ENO Schemes. *Journal of Computational Physics* 126:1 (1996), 202–228. doi : 10.1006/jcph.1996.0130 (cf. p. 138).
[152] Johnsen, E. et F. Ham. Preventing numerical errors generated by interface-capturing schemes in compressible multi-material flows. *Journal of Computational Physics* 231:17 (2012), 5705–5717. doi : 10.1016/j.jcp.2012.04.048 (cf. p. 291, 292, 313).
[153] Jones, W. et B. Launder. The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 15:2 (1972), 301–314. doi : 10.1016/0017-9310(72)90076-2 (cf. p. 52, 93).
[154] Kah, D., F. Laurent, M. Massot et S. Jay. A high order moment method simulating evaporation and advection of a polydisperse liquid spray. *Journal of Computational Physics* 231:2 (2012), 394–422. doi : 10.1016/j.jcp.2011.08.032 (cf. p. 67).
[155] Karni, S. Hybrid Multifluid Algorithms. *SIAM Journal on Scientific Computing* 17:5 (1996), 1019–1039. doi : 10.1137/S106482759528003X (cf. p. 292).
[156] Karni, S. Multicomponent Flow Calculations by a Consistent Primitive Algorithm. *Journal of Computational Physics* 112:1 (1994), 31–43. doi : 10.1006/jcph.1994.1080 (cf. p. 291, 292).
[157] Kaufmann, A., M. Moreau, O. Simonin et J. Helie. Comparison between Lagrangian and mesoscopic Eulerian modelling approaches for inertial particles suspended in decaying isotropic turbulence. *Journal of Computational Physics* 227:13 (2008), 6448–6472. doi : 10.1016/j.jcp.2008.03.004 (cf. p. 47).
[158] Kemm, F. A comparative study of TVD-limiters – well-known limiters and an introduction of new ones. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 67:4 (2011), 404–440. doi : 10.1002/fld.2357 (cf. p. 170, 171).
[159] Kocamustafaogullari, G. et M. Ishii. Foundation of the interfacial area transport equation and its closure relations. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 38:3 (1995), 481–493. doi : 10.1016/0017-9310(94)00183-V (cf. p. 51).
[160] Kolmogorov, A. N. Dissipation of Energy in the Locally Isotropic Turbulence. *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 434:1890 (1991), 15–17. doi : 10.1098/rspa.1991.0076 (cf. p. 52, 88).
[161] Kuo, K. K. *Principles of combustion*. 2nd ed. Hoboken, NJ : John Wiley, 2005 (cf. p. 87, 88).

[162] Labois, M. Modélisation des déséquilibres mécaniques dans les écoulements diphasiques : approches par relaxation et par modèle réduit. Thèse de doct. Université de Provence (Aix-Marseille I), 2008 (cf. p. 44, 45, 48, 49).

[163] Lafon, P., H. Meng, V. Yang* et M. Habiballah. Vaporization of Liquid Oxygen (LOX) Droplets in Hydrogen and Water Environments under Sub- and Super-Critical Conditions. *Combustion Science and Technology* 180:1 (2007), 1–26. doi : 10.1080/00102200701486873 (cf. p. 337, 338).

[164] Lasheras, J. C. et E. J. Hopfinger. Liquid Jet Instability and Atomization in a Coaxial Gas Stream. *Annual Review of Fluid Mechanics* 32:1 (2000), 275–308. doi : 10.1146/annurev.fluid.32.1.275 (cf. p. 30).

[165] Lasheras, J. C., E. Villermaux et E. J. Hopfinger. Break-up and atomization of a round water jet by a high-speed annular air jet. *Journal of Fluid Mechanics* 357 (1998), 351–379. doi : 10.1017/S0022112097008070 (cf. p. 25, 29, 30).

[166] Laurent, F. Numerical analysis of Eulerian multi-fluid models in the context of kinetic formulations for dilute evaporating sprays. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis* 40:3 (2006), 431–468. doi : 10.1051/m2an:2006023 (cf. p. 67).

[167] Laurent, F. et M. Massot. Multi-fluid modelling of laminar polydisperse spray flames : origin, assumptions and comparison of sectional and sampling methods. *Combustion Theory and Modelling* 5:4 (2001), 537–572. doi : 10.1088/1364-7830/5/4/303 (cf. p. 58, 60, 65–67, 263).

[168] Laurent, F., A. Vié, C. Chalons, R. Fox et M. Massot. A hierarchy of Eulerian models for trajectory crossing in particle-laden turbulent flows over a wide range of Stokes numbers. *Annual Research Briefs 2012*. Sous la dir. de Research, C. f. T. Center for Turbulence Research - Stanford University, 2013, 193–204 (cf. p. 58).

[169] Le Touze, C., A. Murrone et H. Guillard. Multislope MUSCL method for general unstructured meshes. *Journal of Computational Physics* 284 (2015), 389–418. doi : 10.1016/j.jcp.2014.12.032 (cf. p. 4, 22, 145, 155, 171).

[170] Le Touze, C., A. Murrone, E. Montreuil et H. Guillard. Eulerian numerical methods on unstructured meshes for the Large Eddy Simulation of sprays within liquid rocket engines. *Proceedings of ECCOMAS 2012*. Vienna, Austria, 2012 (cf. p. 187).

[171] Le Touze, C., A. Murrone et E. Montreuil. Numerical coupling strategies for the "separated-to-dispersed" transition within the liquid phase of cryogenic rocket engines. *5th European Conference for Aeronautics and Space Science*. Munich, Germany, 2013 (cf. p. 4, 187, 191).

[172] LeVeque, R. J. *Finite volume methods for hyperbolic problems*. Cambridge texts in applied mathematics. Cambridge ; New York : Cambridge University Press, 2002 (cf. p. 135).

[173] Lebas, R., T. Menard, P. Beau, A. Berlemont et F. Demoulin. Numerical simulation of primary break-up and atomization : DNS and modelling study. *International Journal of Multiphase Flow* 35:3 (2009), 247–260. doi : 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2008.11.005 (cf. p. 54).

[174] Lebas, R. Modélisation Eulérienne de l'Atomisation Haute Pression - Influences sur la Vaporisation et la Combustion Induite. Thèse de doct. Université de Rouen, 2007 (cf. p. 54, 70).

[175] Leroux, B., O. Delabroy et F. Lacas. Experimental Study of Coaxial Atomizers Scaling. Part I : Dense Core Zone. *Atomization and Sprays* 17:5 (2007), 381–407. doi : 10.1615/AtomizSpr.v17.i5.10 (cf. p. 29–32, 34, 35).

[176] Lesieur, M. *Turbulence in fluids*. New York : Springer, 2008 (cf. p. 88).

[177] Leterrier, N. Discrétisation spatiale en maillage non-structuré de type général. Thèse de doct. Université Pierre et Marie Curie (Paris VI), 2003 (cf. p. 133, 141, 143, 158).

[178] Liou, M.-S. A Sequel to AUSM : AUSM+. *Journal of Computational Physics* 129:2 (1996), 364–382. doi : 10.1006/jcph.1996.0256 (cf. p. 137).

[179] Liou, M.-S. A sequel to AUSM, Part II : AUSM+-up for all speeds. *Journal of Computational Physics* 214:1 (2006), 137–170. doi : 10.1016/j.jcp.2005.09.020 (cf. p. 137).

[180] Liou, M.-S. et C. J. Steffen. A New Flux Splitting Scheme. *Journal of Computational Physics* 107:1 (1993), 23–39. doi : 10.1006/jcph.1993.1122 (cf. p. 137).

[181] Liovic, P. et D. Lakehal. Multi-physics treatment in the vicinity of arbitrarily deformable gas–liquid interfaces. *Journal of Computational Physics* 222:2 (2007), 504–535. doi : 10.1016/j.jcp.2006.07.030 (cf. p. 43).

[182] Liu, X.-D., S. Osher et T. Chan. Weighted Essentially Non-oscillatory Schemes. *Journal of Computational Physics* 115:1 (1994), 200–212. doi : 10.1006/jcph.1994.1187 (cf. p. 138).

[183] Magnussen, B. et B. Hjertager. On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. *Symposium (International) on Combustion* 16:1 (1977), 719–729. doi : 10.1016/S0082-0784(77)80366-4 (cf. p. 129, 130).

[184] Marble, F. et J. Broadwell. *The Coherent Flame Model for Turbulent Chemical Reactions*. Technical report TRW. NTIS, 1982 (cf. p. 51).

[185] Margolin, L. G., P. K. Smolarkiewicz et A. A. Wyszogradzki. Dissipation in Implicit Turbulence Models : A Computational Study. *Journal of Applied Mechanics* 73:3 (2006), 469. doi : 10.1115/1.2176749 (cf. p. 95).
[186] Marmottant, P. et E. Villermaux. On spray formation. *Journal of Fluid Mechanics* 498 (2004), 73–111. doi : 10.1017/S0022112003006529 (cf. p. 31–35, 197).
[187] Massot, M. Eulerian Multi-Fluid Models for Polydisperse Evaporating Sprays. *Multiphase Reacting Flows : Modelling and Simulation*. Sous la dir. de Marchisio, D. L. et R. O. Fox. T. 492. Vienna : Springer Vienna, 2007, 79–123 (cf. p. 47).
[188] Massot, M., F. Laurent, D. Kah et S. de Chaisemartin. A Robust Moment Method for Evaluation of the Disappearance Rate of Evaporating Sprays. *SIAM Journal on Applied Mathematics* 70:8 (2010), 3203–3234. doi : 10.1137/080740027 (cf. p. 67).
[189] Mauriot, Y. et R. Prud'homme. Assessment of evaporation equilibrium and stability concerning an acoustically excited drop in combustion products. *Comptes Rendus Mécanique* 342:4 (2014), 240–253. doi : 10.1016/j.crme.2014.02.004 (cf. p. 326).
[190] McGraw, R. Description of Aerosol Dynamics by the Quadrature Method of Moments. *Aerosol Science and Technology* 27:2 (1997), 255–265. doi : 10.1080/02786829708965471 (cf. p. 58).
[191] Ménard, T. *Développement d'une méthode Level Set pour le suivi d'interface. Application de la rupture de jet liquide*. 2007 (cf. p. 42).
[192] Ménard, T., S. Tanguy et 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 (2007), 510–524. doi : 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2006.11.001 (cf. p. 42, 43).
[193] Meneveau, C. et J. Katz. Scale-Invariance and Turbulence Models for Large-Eddy Simulation. *Annual Review of Fluid Mechanics* 32:1 (2000), 1–32. doi : 10.1146/annurev.fluid.32.1.1 (cf. p. 43, 94).
[194] Meyers, N. Modélisation de la combustion cryotechnique avec prise en compte de l'atomisation primaire du jet d'oxygène liquide. Thèse de doct. Université d'Aix-Marseille II, 2006 (cf. p. 3, 27, 29, 44, 45, 53, 129, 313, 314).
[195] Moin, P. et K. Mahesh. Direct Numerical Simulation : A Tool in Turbulence Research. *Annual Review of Fluid Mechanics* 30:1 (1998), 539–578. doi : 10.1146/annurev.fluid.30.1.539 (cf. p. 89).
[196] Morel, C., N. Goreaud et J.-M. Delhaye. The local volumetric interfacial area transport equation : derivation and physical significance. *International Journal of Multiphase Flow* 25:6-7 (1999), 1099–1128. doi : 10.1016/S0301-9322(99)00040-3 (cf. p. 51).
[197] Moule, Y., V. Sabelnikov et A. Mura. Highly resolved numerical simulation of combustion in supersonic hydrogen–air coflowing jets. *Combustion and Flame* 161:10 (2014), 2647–2668. doi : 10.1016/j.combustflame.2014.04.011 (cf. p. 94).
[198] Murrone, A. et P. Villedieu. Numerical Modeling of Dispersed Two-Phase Flows. *AerospaceLab Journal* 2 (2011), 34–46 (cf. p. 75).
[199] Murrone, A., N. Fdida, C. Le Touze et L. Vingert. Atomization of cryogenic rocket engines coaxial injectors. Modeling aspects and experimental investigations. *Space Propulsion 2014*. Cologne, Germany, 2014 (cf. p. 4, 191).
[200] Murrone, A. Modèles bi-fluides à six et sept équations pour les écoulements diphasiques à faible nombre de Mach. THESE. Université de Provence - Aix-Marseille I, 2003 (cf. p. 47).
[201] Murrone, A. et H. Guillard. A five equation reduced model for compressible two phase flow problems. *Journal of Computational Physics* 202:2 (2005), 664–698. doi : 10.1016/j.jcp.2004.07.019 (cf. p. 47, 48).
[202] Murrone, A. et H. Guillard. Behavior of upwind scheme in the low Mach number limit : III. Preconditioned dissipation for a five equation two phase model. *Computers & Fluids* 37:10 (2008), 1209–1224. doi : 10.1016/j.compfluid.2006.12.010 (cf. p. 140, 157).
[203] Natalini, R. *Recent Mathematical Results on Hyperbolic Relaxation Problems*. 1998 (cf. p. 49).
[204] O'Rourke, P. *Collective Drop Effects on Vaporizing Liquid Sprays*. Princeton University, 1981 (cf. p. 56).
[205] O'Rourke, P. et M. Sahota. A Variable Explicit/Implicit Numerical Method for Calculating Advection on Unstructured Meshes. *Journal of Computational Physics* 143:2 (1998), 312–345. doi : 10.1006/jcph.1998.5903 (cf. p. 145).
[206] O'Rourke, P. J. et A. A. Amsden. *The Tab Method for Numerical Calculation of Spray Droplet Breakup*. Rap. tech. 872089. Warrendale, PA : SAE International, 1987 (cf. p. 126).
[207] Olsson, E. et G. Kreiss. A conservative level set method for two phase flow. *Journal of Computational Physics* 210:1 (2005), 225–246. doi : 10.1016/j.jcp.2005.04.007 (cf. p. 41).
[208] Olsson, E., G. Kreiss et S. Zahedi. A conservative level set method for two phase flow II. *Journal of Computational Physics* 225:1 (2007), 785–807. doi : 10.1016/j.jcp.2006.12.027 (cf. p. 42).

[209] Osher, S. Convergence of Generalized MUSCL Schemes. *SIAM Journal on Numerical Analysis* 22:5 (1985), 947–961. doi : 10.1137/0722057 (cf. p. 157).
[210] Osher, S. et R. P. Fedkiw. Level Set Methods : An Overview and Some Recent Results. *Journal of Computational Physics* 169:2 (2001), 463–502. doi : 10.1006/jcph.2000.6636 (cf. p. 41).
[211] Osher, S. et J. A. Sethian. Fronts propagating with curvature-dependent speed : Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *Journal of Computational Physics* 79:1 (1988), 12–49. doi : 10.1016/0021-9991(88)90002-2 (cf. p. 41).
[212] Park, J. S., S.-H. Yoon et C. Kim. Multi-dimensional limiting process for hyperbolic conservation laws on unstructured grids. *Journal of Computational Physics* 229:3 (2010), 788–812. doi : 10.1016/j.jcp.2009.10.011 (cf. p. 145).
[213] Pilch, M. et C. Erdman. Use of breakup time data and velocity history data to predict the maximum size of stable fragments for acceleration-induced breakup of a liquid drop. *International Journal of Multiphase Flow* 13:6 (1987), 741–757. doi : 10.1016/0301-9322(87)90063-2 (cf. p. 122, 124, 125).
[214] Plateau, J. *Statique expérimentale et théorique des liquides soumis aux seules forces moléculaires*. Statique expérimentale et théorique des liquides soumis aux seules forces moléculaires vol. 2. Gauthier-Villars, 1873 (cf. p. 27).
[215] Pope, S. B. *Turbulent flows*. Cambridge ; New York : Cambridge University Press, 2000 (cf. p. 88).
[216] Pougatch, K., M. Salcudean, E. Chan et B. Knapper. A two-fluid model of gas-assisted atomization including flow through the nozzle, phase inversion, and spray dispersion. *International Journal of Multiphase Flow* 35:7 (2009), 661–675. doi : 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2009.03.001 (cf. p. 122).
[217] Pougatch, K., J. McMillan et M. Salcudean. Average droplet diameter spatial distribution in a spray after gas-assisted premixed atomization. *Atomization and Sprays* 21:8 (2011), 687–709. doi : 10.1615/AtomizSpr.2012004379 (cf. p. 122, 123, 125).
[218] Pourouchottamane, M. Modélisation des brouillards denses pour la combustion cryotechnique. Thèse de doct. Université d'Aix-Marseille II, 2002 (cf. p. 3, 53, 56, 76).
[219] Pourouchottamane, M., F. Dupoirieux, L. Vingert, M. Habiballah et V. Burnley. *Numerical Analysis of the 10 Bar Mascotte Flow Field*. Rap. tech. Chatillon (France) : Office National d'Etudes et de Recherches Aerospatiales, 2001 (cf. p. 57).
[220] Prud'homme, R., M. Habiballah, L. Matuszewski, Y. Mauriot et A. Nicole. Theoretical Analysis of Dynamic Response of a Vaporizing Droplet to Acoustic Oscillations. *Journal of Propulsion and Power* 26:1 (2010), 74–83. doi : 10.2514/1.39379 (cf. p. 120).
[221] Rayleigh. On The Instability Of Jets. *Proceedings of the London Mathematical Society* s1-10:1 (1878), 4–13. doi : 10.1112/plms/s1-10.1.4 (cf. p. 27).
[222] Reboux, S., P. Sagaut et D. Lakehal. Large-eddy simulation of sheared interfacial flow. *Physics of Fluids* 18:10 (2006), 105105. doi : 10.1063/1.2359745 (cf. p. 43).
[223] Refloch, A., B. Courbet, A. Murrone, P. Villedieu, C. Laurent, P. Gilbank, J. Troyes, L. Tessé, G. Chaineray, J. Dargaud, E. Quémerais et F. Vuillot. CEDRE Software. *AerospaceLab Journal* 2 (2011), 131–140 (cf. p. 75).
[224] Rehab, H., E. Villermaux et E. J. Hopfinger. Geometrical Effects on the Near-Field Flow Structure of Coaxial Jets. *AIAA Journal* 36:5 (1998), 867–869. doi : 10.2514/2.449 (cf. p. 34).
[225] Reitz, R. D. Mechanism of atomization of a liquid jet. *Physics of Fluids* 25:10 (1982), 1730. doi : 10.1063/1.863650 (cf. p. 27, 28, 32).
[226] Reitz, R. *Atomization and Other Breakup Regimes of a Liquid Jet*. Princeton University, 1978 (cf. p. 27).
[227] Reitz, R. et F. Bracco. Mechanisms of Breakup of Round Liquid Jets. *The Encyclopedia of Fluid Mechanics*. Gulf Publishing. T. 3. Houston, Texas : N. Cheremisnoff, 1986, 233–249 (cf. p. 26, 28, 33).
[228] Reitz, R. D. et R. Diwakar. *Structure of High-Pressure Fuel Sprays*. Rap. tech. 870598. Warrendale, PA : SAE International, 1987 (cf. p. 58).
[229] Riber, E., V. Moureau, M. García, T. Poinsot et O. Simonin. Evaluation of numerical strategies for large eddy simulation of particulate two-phase recirculating flows. *Journal of Computational Physics* 228:2 (2009), 539–564. doi : 10.1016/j.jcp.2008.10.001 (cf. p. 47).
[230] Richardson, L. F. *Weather Prediction by Numerical Process*. 2nd ed. Cambridge mathematical library. Cambridge : New York : Cambridge University Press, 2007 (cf. p. 88).
[231] Roe, P. Approximate Riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes. *Journal of Computational Physics* 43:2 (1981), 357–372. doi : 10.1016/0021-9991(81)90128-5 (cf. p. 137, 139).
[232] Ruger, M., S. Hohmann, M. Sommerfeld et G. Kohnen. Euler/Lagrange Calculations of Turbulent Sprays : The Effect of Droplet Collisions and Coalescence. *Atomization and Sprays* 10:1 (2000) (cf. p. 56).
[233] Ruiz, E. *Modélisation de l'évaporation-condensation d'une goutte en évolution dans un écoulement gazeux. Implantation des modèles dans le solveur SPIREE de CEDRE*. Rap. tech. 2/07999/DEFA. ONERA, 2004 (cf. p. 317, 318, 320).

[234] Saad, Y. et M. H. Schultz. GMRES : A Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* 7:3 (1986), 856–869. doi : 10.1137/0907058 (cf. p. 151).

[235] Sagaut, P. *Large eddy simulation for incompressible flows an introduction*. Berlin ; New York : Springer-Verlag, 2006 (cf. p. 43, 90, 94).

[236] Sainte-Rose, B. Numerical simulations of separated reactive flow using an hybrid RANS-LES approach. Theses. Ecole Centrale Paris, 2010 (cf. p. 150).

[237] Saurel, R. et R. Abgrall. A Multiphase Godunov Method for Compressible Multifluid and Multiphase Flows. *Journal of Computational Physics* 150:2 (1999), 425–467. doi : 10.1006/jcph.1999.6187 (cf. p. 47, 48, 293, 313).

[238] Saurel, R. et R. Abgrall. A Simple Method for Compressible Multifluid Flows. *SIAM Journal on Scientific Computing* 21:3 (1999), 1115–1145. doi : 10.1137/S1064827597323749 (cf. p. 292).

[239] Saurel, R. et O. Lemetayer. A multiphase model for compressible flows with interfaces, shocks, detonation waves and cavitation. *Journal of Fluid Mechanics* 431 (2001), 239–271. doi : 10.1017/S0022112000003098 (cf. p. 291–293, 313).

[240] Scherrer, D. *PEA APTE : Travaux de modélisation et de simulations numériques avec le code CEDRE.* Rapport technique RT 1/17312. 2010 (cf. p. 140).

[241] Scherrer, D., F. Chedevergne, P. Grenard, J. Troyes, A. Murrone, E. Montreuil, F. Vuillot, N. Lupoglazoff, M. Huet, B. Sainte-Rose, P. Thorigny, N. Bertier, J. Lamet, T. Le Pichon, E. Radenac, A. Nicole, L. Matuszewski et M. Errera. Recent CEDRE Applications. *AerospaceLab Journal* 2 (2011), 131–140 (cf. p. 75).

[242] Schiestel, R. *Les écoulements turbulents : modélisation et simulation*. 1998 (cf. p. 88).

[243] Schiller, L. et Z. Naumann. A drag coefficient correlation. *Ver. Deutsch. Ing.* (1935), 77–318 (cf. p. 119).

[244] Schlichting, H. *Boundary-layer theory*. 8th rev. and enl. ed. Berlin ; New York : Springer, 2000 (cf. p. 36).

[245] Sethian, J. A. *Level set methods and fast marching methods : evolving interfaces in computational geometry, fluid mechanics, computer vision, and materials science*. 2nd ed. Cambridge monographs on applied and computational mathematics 3. Cambridge, U.K. ; New York : Cambridge University Press, 1999 (cf. p. 41).

[246] Shinjo, J. et A. Umemura. Simulation of liquid jet primary breakup : Dynamics of ligament and droplet formation. *International Journal of Multiphase Flow* 36:7 (2010), 513–532. doi : 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2010.03.008 (cf. p. 42).

[247] Shu, C.-W. et S. Osher. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes, II. *Journal of Computational Physics* 83:1 (1989), 32–78. doi : 10.1016/0021-9991(89)90222-2 (cf. p. 137).

[248] Shu, C.-W. et S. Osher. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes. *Journal of Computational Physics* 77:2 (1988), 439–471. doi : 10.1016/0021-9991(88)90177-5 (cf. p. 137).

[249] Shyue, K.-M. A Fluid-Mixture Type Algorithm for Compressible Multicomponent Flow with van der Waals Equation of State. *Journal of Computational Physics* 156:1 (1999), 43–88. doi : 10.1006/jcph.1999.6349 (cf. p. 292).

[250] Shyue, K.-M. An Efficient Shock-Capturing Algorithm for Compressible Multicomponent Problems. *Journal of Computational Physics* 142:1 (1998), 208–242. doi : 10.1006/jcph.1998.5930 (cf. p. 292).

[251] Sibra, A. Modélisation et étude de l'évaporation et de la combustion de gouttes dans les moteurs à propergol solide par une approche eulérienne Multi-Fluide. Thèse de doct. Ecole Centrale Paris, 2014 (cf. p. 58, 67–69, 126, 127, 146, 245, 246, 280, 283, 284).

[252] Sibra, A., J. Dupays, A. Murrone, F. Laurent et M. Massot. Simulation of reactive polydisperse sprays strongly coupled to unsteady flows in solid rocket motors : Efficient strategy using Eulerian Multi-Fluid methods. *Preprint submitted to Journal of Computational Physics* (2014) (cf. p. 67–69, 126, 127, 146, 245, 283, 284).

[253] Sirignano, W. A. The Formulation of Spray Combustion Models : Resolution Compared to Droplet Spacing. *Journal of Heat Transfer* 108:3 (1986), 633. doi : 10.1115/1.3246983 (cf. p. 200).

[254] Sirignano, W. A. Volume averaging for the analysis of turbulent spray flows. *International Journal of Multiphase Flow* 31:6 (2005), 675–705. doi : 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2005.02.005 (cf. p. 200).

[255] Smagorinsky, J. General Circulation Experiments with the Primitive Equations. *Monthly Weather Review* 91 (1963), 99. doi : 10.1175/1520-0493(1963)091<0099:GCEWTP>2.3.CO;2 (cf. p. 43, 94).

[256] Sommerfeld, M. et E. Deux. Modeling of Turbulent Atomization Combining a Two-Fluid and a Structure Function Approach. *Atomization and Sprays* 16:1 (2006), 103–126. doi : 10.1615/AtomizSpr.v16.i1.70 (cf. p. 70).

[257] Spalding, D. Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames. *Symposium (International) on Combustion* 13:1 (1971), 649–657. doi : 10.1016/S0082-0784(71)80067-X (cf. p. 129).

[258] Spekreijse, S. Multigrid Solution of Monotone Second-Order Discretizations of Hyperbolic Conservation Laws. *Mathematics of Computation* 49:179 (1987), 135. doi : 10.2307/2008254 (cf. p. 157).

[259] Steger, J. L. et R. Warming. Flux vector splitting of the inviscid gasdynamic equations with application to finite-difference methods. *Journal of Computational Physics* 40:2 (1981), 263–293. doi : 10.1016/0021-9991(81)90210-2 (cf. p. 137).

[260] Stewart, H. B. et B. Wendroff. Two-phase flow : Models and methods. *Journal of Computational Physics* 56:3 (1984), 363–409. doi : 10.1016/0021-9991(84)90103-7 (cf. p. 48).

[261] Stoufflet, B., J. Periaux, F. Fezoui et A. Dervieux. Numerical simulation of 3-D hypersonic Euler flows around space vehicles using adapted finite elements. American Institute of Aeronautics et Astronautics, 1987. doi : 10.2514/6.1987-560 (cf. p. 157).

[262] Strang, G. On the Construction and Comparison of Difference Schemes. *SIAM Journal on Numerical Analysis* 5:3 (1968), 506–517. doi : 10.1137/0705041 (cf. p. 147).

[263] Sussman, M. et E. G. Puckett. A Coupled Level Set and Volume-of-Fluid Method for Computing 3D and Axisymmetric Incompressible Two-Phase Flows. *Journal of Computational Physics* 162:2 (2000), 301–337. doi : 10.1006/jcph.2000.6537 (cf. p. 42).

[264] Sutherland, W. The viscosity of gases and molecular force. *Philosophical Magazine Series 5* 36:223 (1893), 507–531. doi : 10.1080/14786449308620508 (cf. p. 87).

[265] Sweby, P. K. High Resolution Schemes Using Flux Limiters for Hyperbolic Conservation Laws. *SIAM Journal on Numerical Analysis* 21:5 (1984), 995–1011. doi : 10.1137/0721062 (cf. p. 157).

[266] Tessé, L. et J. Lamet. Radiative Transfer Modeling Developed at Onera for Numerical Simulations of Reactive Flows. *AerospaceLab Journal* Issue 2 (2011) (cf. p. 75).

[267] Toro, E. F. *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics : a practical introduction*. 3rd ed. Dordrecht ; New York : Springer, 2009 (cf. p. 135, 137, 139).

[268] Toro, E., M. Spruce et W. Speares. Restoration of the contact surface in the HLL-Riemann solver. *Shock Waves* 4:1 (1994), 25–34. doi : 10.1007/BF01414629 (cf. p. 137, 138, 140).

[269] Trotter, H. F. On the product of semi-groups of operators. *Proceedings of the American Mathematical Society* 10:4 (1959), 545–545. doi : 10.1090/S0002-9939-1959-0108732-6 (cf. p. 147).

[270] Tryggvason, G., B. Bunner, A. Esmaeeli, D. Juric, N. Al-Rawahi, W. Tauber, J. Han, S. Nas et Y.-J. Jan. A Front-Tracking Method for the Computations of Multiphase Flow. *Journal of Computational Physics* 169:2 (2001), 708–759. doi : 10.1006/jcph.2001.6726 (cf. p. 41, 258).

[271] Turkel, E. Preconditioning techniques in computational fluid dynamics. *Annual Review of Fluid Mechanics* 31:1 (1999), 385–416. doi : 10.1146/annurev.fluid.31.1.385 (cf. p. 140).

[272] Turkel, E. Review of preconditioning methods for fluid dynamics. *Applied Numerical Mathematics* 12:1-3 (1993), 257–284. doi : 10.1016/0168-9274(93)90122-8 (cf. p. 140).

[273] Turkel, E. Preconditioned methods for solving the incompressible and low speed compressible equations. *Journal of Computational Physics* 72:2 (1987), 277–298. doi : 10.1016/0021-9991(87)90084-2 (cf. p. 140).

[274] Vallet, A. Contribution à la Modélisation de l'Atomisation d'un Jet Liquide Haute Pression. Thèse de doct. Université de Rouen, 1997 (cf. p. 51).

[275] Vallet, A., A. Burluka et R. Borghi. Development of a eulerian model for the atomization of a liquid jet. *Atomization and Sprays* 11:6 (2001) (cf. p. 3, 51–54).

[276] Vallet, A. et R. Borghi. Modélisation eulerienne de l'atomisation d'un jet liquide. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences - Series IIB - Mechanics-Physics-Astronomy* 327:10 (1999), 1015–1020. doi : 10.1016/S1287-4620(00)87013-1 (cf. p. 51).

[277] Van Leer, B. Flux-vector splitting for the Euler equations. *Eighth International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics*. T. 170. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 1982, 507–512 (cf. p. 137).

[278] Van Leer, B. Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second-order sequel to Godunov's method. *Journal of Computational Physics* 32:1 (1979), 101–136. doi : 10.1016/0021-9991(79)90145-1 (cf. p. 142, 157, 160).

[279] Veynante, D. et L. Vervisch. Turbulent combustion modeling. *Progress in Energy and Combustion Science* 28:3 (2002), 193–266. doi : 10.1016/S0360-1285(01)00017-X (cf. p. 128).

[280] Vié, A., F. Doisneau et M. Massot. On the Anisotropic Gaussian velocity closure for inertial-particle laden flows. *Communications in Computational Physics* 17:1 (2015), 1–46. doi : 10.4208/cicp.021213.140514a (cf. p. 62, 63).

[281] Vié, A., F. Laurent et M. Massot. Size-velocity correlations in hybrid high order moment/multi-fluid methods for polydisperse evaporating sprays : Modeling and numerical issues. *Journal of Computational Physics* 237 (2013), 177–210. doi : 10.1016/j.jcp.2012.11.043 (cf. p. 69).

[282] Vié, A., C. Chalons, R. Fox, F. Laurent et M. Massot. A multi-Gaussian quadrature method of moments for simulating high Stokes number turbulent two-phase flows. *Annual Research Brief of the Center for Turbulence Research - Stanford University*. Center for Turbulence Research - Stanford University, 2012, 309–320 (cf. p. 58).

[283] Villermaux, E. Fragmentation. *Annual Review of Fluid Mechanics* 39:1 (2007), 419–446. doi : 10.1146/annurev.fluid.39.050905.110214 (cf. p. 25, 34).

[284] Villermaux, E., P. Marmottant et J. Duplat. Ligament-Mediated Spray Formation. *Physical Review Letters* 92:7 (2004). doi : 10.1103/PhysRevLett.92.074501 (cf. p. 35).

[285] Villermaux, E. Mixing and Spray Formation in Coaxial Jets. *Journal of Propulsion and Power* 14:5 (1998), 807–817. doi : 10.2514/2.5344 (cf. p. 25, 34).

[286] Villermaux, E. et B. Bossa. Single-drop fragmentation determines size distribution of raindrops. *Nature Physics* 5:9 (2009), 697–702. doi : 10.1038/nphys1340 (cf. p. 34).

[287] Villermaux, E. et F. Eloi. The distribution of raindrops speeds. *Geophysical Research Letters* 38:19 (2011), n/a–n/a. doi : 10.1029/2011GL048863 (cf. p. 35).

[288] Vincent, S. et J.-P. Caltagirone. A One-Cell Local Multigrid Method for Solving Unsteady Incompressible Multiphase Flows. *Journal of Computational Physics* 163:1 (2000), 172–215. doi : 10.1006/jcph.2000.6566 (cf. p. 41).

[289] Vingert. *Sélection de cas tests Mascotte : - cas subcritique LOX/GH2 10 bar. - cas supercritique LOX/GH2 60 bar.* Rapport technique RT 1/11785. ONERA, 2006 (cf. p. 19, 232, 234, 236, 238).

[290] Vingert, L., M. Habiballah et P. Hervat. MASCOTTE, version V03 : aspects banc, boîtier et recette. Paris, 1997 (cf. p. 2, 18).

[291] Vingert, L., M. Habiballah et J. C. Traineau. MASCOTTE : a research test facility for high pressure combustion of cryogenic propellants. *12th European Aerospace Conference*. Paris, 1999 (cf. p. 2, 18).

[292] Vingert, L., M. Habiballah, P. Gicquel, E. Brisson, S. Candel, G. Herding, R. Snyder, P. Scouflaire, C. Rolon, D. Stepowski, A. Cessou, R. Bazile, P. Colin, S. Guerre, M. Pealat, F. Grisch et P. Bouchardy. Optical diagnostics for cryogenic liquid propellants combustion. T. 598. Propulsion and energetics panel. Brussels : AGARD, 1997, 44.1–44.12 (cf. p. 2, 18).

[293] Viollet, P. L. et O. Simonin. Modelling Dispersed Two-Phase Flows : Closure, Validation and Software Development. *Applied Mechanics Reviews* 47:6S (1994), S80. doi : 10.1115/1.3124445 (cf. p. 123).

[294] Volpe, G. Performance of compressible flow codes at low Mach numbers. *AIAA Journal* 31:1 (1993), 49–56. doi : 10.2514/3.11317 (cf. p. 140).

[295] Von Terzi, D., R. Sandberg et H. Fasel. Identification of large coherent structures in supersonic axisymmetric wakes. *Computers & Fluids* 38:8 (2009), 1638–1650. doi : 10.1016/j.compfluid.2009.01.007 (cf. p. 194).

[296] Vreugdenhil, C. B. *Numerical Methods for Shallow-Water Flow*. Dordrecht : Springer Netherlands, 1994 (cf. p. 202).

[297] Wallis, G. *One-dimensional two-phase flow*. McGraw-Hill, 1969 (cf. p. 105).

[298] Waterson, N. et H. Deconinck. Design principles for bounded higher-order convection schemes – a unified approach. *Journal of Computational Physics* 224:1 (2007), 182–207. doi : 10.1016/j.jcp.2007.01.021 (cf. p. 170, 171).

[299] Wert, K. A rationally-based correlation of mean fragment size for drop secondary breakup. *International Journal of Multiphase Flow* 21:6 (1995), 1063–1071. doi : 10.1016/0301-9322(95)00036-W (cf. p. 122, 125, 126).

[300] Williams, F. A. Spray Combustion and Atomization. *Physics of Fluids* 1:6 (1958), 541. doi : 10.1063/1.1724379 (cf. p. 55).

[301] Williams, F. *Combustion theory*. Addison-Wesley series in engineering science. Addison-Wesley Pub. Co., 1965 (cf. p. 325).

[302] Woodward, P. et P. Colella. The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks. *Journal of Computational Physics* 54:1 (1984), 115–173. doi : 10.1016/0021-9991(84)90142-6 (cf. p. 182–184).

[303] Wu, P.-K et G. Faeth. Aerodynamic effects on primary breakup of turbulent liquids. *Atomization and Sprays* 3:3 (1993), 265–289 (cf. p. 28).

[304] Wu, P.-K, R. Miranda et G. Faeth. Effects of initial flow conditions on primary breakup of nonturbulent and turbulent round liquid jets. *Atomization and Sprays* 5:2 (1995), 175–196 (cf. p. 28).

[305] Yuan, C. et R. Fox. Conditional quadrature method of moments for kinetic equations. *Journal of Computational Physics* 230:22 (2011), 8216–8246. doi : 10.1016/j.jcp.2011.07.020 (cf. p. 58).

[306] Yuan, C., F. Laurent et R. Fox. An extended quadrature method of moments for population balance equations. *Journal of Aerosol Science* 51 (2012), 1–23. doi : 10.1016/j.jaerosci.2012.04.003 (cf. p. 58).

[307] Zhao, J.-C. A Mnemonic Scheme for Thermodynamics. *MRS Bulletin* 34:02 (2009), 92–94. doi : 10.1557/mrs2009.26 (cf. p. 97).

[308] Zuzio, D., A. Murrone, P. Villedieu, F. Haider, B. Courbet, D. Scherrer et F. Vuillot. *CEDRE, solveur multi-fluides : travaux 2011-2012.* Rapport technique RT 2/17679. 2013 (cf. p. 44, 83, 140).

[309] Zuzio, D., J.-L. Estivalezes, P. Villedieu et G. Blanchard. Numerical simulation of primary and secondary atomization. *Comptes Rendus Mécanique* 341:1-2 (2013), 15–25. doi : 10.1016/j.crme.2012.10.003 (cf. p. 77).