# Modélisation et étude de l'évaporation et de la combustion de gouttes dans les moteurs à propergol solide par une approche eulérienne Multi-Fluide

Alaric Sibra

▶ **To cite this version:**

Alaric Sibra. Modélisation et étude de l'évaporation et de la combustion de gouttes dans les moteurs à propergol solide par une approche eulérienne Multi-Fluide. Autre. Université Paris Saclay (COmUE), 2015. Français. NNT : 2015SACLC019 . tel-01260314

**HAL Id: tel-01260314**

**https://theses.hal.science/tel-01260314**

Submitted on 21 Jan 2016

**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.

CentraleSupélec

université PARIS-SACLAY

ÉCOLE DOCTORALE
Sciences mécaniques et énergétiques, matériaux et géosciences (SMEMAG)

**NNT : 2015SACLC019**

# THESE DE DOCTORAT
DE
L'UNIVERSITE PARIS-SACLAY
PREPAREE A
L'ECOLE CENTRALESUPELEC

ECOLE DOCTORALE N°579
Sciences mécaniques et énergétiques, matériaux et géosciences

Spécialité de doctorat : Energétique, Mathématiques Appliquées

Par

**M. Alaric SIBRA**

## 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 présentée et soutenue à l'Ecole CentraleSupélec le 27 novembre 2015 :**

**Composition du Jury :**

| | |
|---|---|
| M. Giovangigli Vincent, | Président du jury |
| M. Réveillon Daniel, | Rapporteur |
| M. Daniel Eric | Rapporteur |
| M. Merlen Alain, | Examinateur |
| M. Massot Marc, | Directeur de thèse |
| Mme Laurent Frédérique, | Co-directrice de thèse |
| M. Dupays Joël, | Encadrant ONERA |
| Mme Cesco Nathalie, | Invitée |
| M. Godfroy Franck, | Invité |

université PARIS-SACLAY
ÉCOLE DOCTORALE
Sciences mécaniques et énergétiques, matériaux et géosciences (SMEMAG)

**Titre :** Modélisation et étude de l'évaporation et de la combustion de gouttes dans les moteurs à propergol solide par une approche eulérienne Multi-Fluide

**Mots clés :** Propulsion solide, Sprays polydisperses, Méthodes eulériennes, Couplage fort et code CEDRE

**Résumé :** En propulsion solide, l'ajout de particules d'aluminium dans le propergol améliore de façon significative les performances du moteur grâce à une augmentation sensible de la température de chambre. La présence de gouttes d'aluminium et de résidus d'alumine de différentes tailles et en quantité importante a un impact notoire sur le fonctionnement du moteur, en particulier sur sa stabilité. Dans cette optique, nous souhaitons obtenir une meilleure prévision de la stabilité de fonctionnement en cas de déclenchement d'instabilités d'origine aéroacoustique ou thermoacoustique. Nous visons des calculs plus précis de l'étendue de la zone de combustion et du profil thermique en son sein, de la chaleur dégagée par la combustion distribuée des gouttes et de la distribution en taille des résidus d'alumine en fin de combustion. Nos efforts ont porté sur la modélisation des échanges entre la phase gazeuse et cette phase dispersée composée de gouttes de nature et de taille très diverses. Le paramètre taille pilotant la dynamique du spray et le couplage avec le gaz, le suivi précis des changements de taille est un enjeu majeur.

Dans cette contribution, nous avons choisi une approche cinétique pour la description des sprays polydisperses. L'équation cinétique de Williams-Boltzmann utilisée pour suivre l'évolution des propriétés de la phase dispersée est résolue par une approche eulérienne. Les méthodes Multi-Fluide (MF) traitent naturellement les changements de taille des gouttes tels que l'évaporation et la coalescence. Ces méthodes reposent sur une intégration continue de la variable taille sur des intervalles fixes appelés sections sur lesquels nous pouvons dériver des systèmes d'équations de conservation. Chaque système est vu comme un fluide différent qui est en couplage fort avec la phase gazeuse via des termes sources. Nous avons travaillé sur une méthode MF à deux moments en taille basée sur une famille de fonctions de forme polynomiale pour reconstruire la distribution en taille au sein des sections. Cette approche d'ordre deux en temps et en espace s'avère performante car elle décrit avec précision l'évolution de la distribution avec un nombre modéré de sections.

Un travail original a également été mené afin d'étendre l'approche Multi-Fluide à des gouttes bicomposants. Cette méthode ouvre la voie à des modèles de combustion des gouttes d'aluminium plus représentatifs, et donc à des études plus avancées de la zone de combustion distribuée. Dans le contexte des simulations diphasiques instationnaires, nous avons porté une attention particulière à l'emploi d'une stratégie numérique robuste et précise pour le couplage entre les phases modélisées par une approche Euler-Euler. Nous montrons qu'une méthode de splitting séparant le traitement du transport des phases gazeuse/dispersée de celui des termes sources est particulièrement adaptée pour la résolution d'un problème multi-échelle spatial et temporel. Dans la mesure où les conditions de réalisabilité sur les moments en taille des méthodes MF ne sont pas garanties avec des méthodes d'intégration traditionnelles, nous avons développé des schémas innovants pour l'intégration des termes sources.

L'ensemble des travaux proposés dans cette contribution répond à deux exigences : 1- un ratio coût/précision attractif pour des simulations industrielles 2- une facilité d'implémentation des méthodes et une modularité assurant la pérennisation des codes industriels.

Ces développements ont d'abord été vérifiés à l'aide d'un code ad hoc ; des cas test d'étude d'acoustique diphasique linéaire ont notamment souligné la pertinence de la technique de splitting pour restituer avec précision les interactions spray-acoustique. Les nouvelles méthodes ont ensuite été implémentées et validées au sein du code multi-physique CEDRE développé à l'ONERA. Des calculs de propulsion solide sur des configurations moteur réalistes ont finalement mis en évidence le niveau de maturité atteint par les méthodes eulériennes pour décrire avec fidélité la dynamique des sprays polydisperses. Les résultats de ces simulations ont mis en avant la sensibilité des niveaux d'instabilités en fonction de la distribution en taille des gouttes d'aluminium et des résidus.

**Université Paris-Saclay**
Espace Technologique / Immeuble Discovery
Route de l'Orme aux Merisiers RD 128 / 91190 Saint-Aubin, France

**Title :** Eulerian Multi-Fluid modeling and simulation of evaporation and combustion of polydisperse sprays in solid rocket motors

**Keywords :** Solid propulsion, Polydisperse sprays, Eulerian size moment methods, Unsteady two-way coupling, CEDRE code

**Abstract :** The addition of a significant mass fraction of aluminum particle in the propellant of Solid Rocket Motors improves performance through an increase of the temperature in the combustion chamber. The distributed combustion of aluminum droplets in a portion of the chamber yields a massive amount of disperse aluminum oxide residues with a large size spectrum, called a polydisperse spray, in the entire volume. The spray can have a significant impact on the motor behavior and in particular on the onset/damping of instability. When dealing with aeroacoustical and thermoacoustical instabilities, the faithful prediction of the interactions between the gaseous phase and the spray is a determining step for understanding the physical mechanisms and for future solid rocket motor optimization. In such a harsh environment, experimental measurements have a hard time providing detailed explanation of the physical mechanisms and one has to resort to numerical simulation. For such a purpose, the distributed combustion zone and thermal profile therein, the heat generated by the combustion of the dispersed droplets and the large size distribution of the aluminum oxide residues and its coupling with he gaseous phase hydrodynamic and acoustic fields have to be accurately reproduced through a proper level of modeling and a high fidelity simulation including a precise resolution of size polydispersity, which is a key parameter.

In this contribution, we choose a kinetic approach for the description of polydisperse sprays. The Williams-Boltzmann Equation is used to model the disperse phase and we derive a fully Eulerian approach through moment methods. The Multi-Fluid (MF) methods naturally treat droplet size evolution through phenomena such as evaporation and coalescence. These methods rely on the conservation of size moments on fixed intervals called sections and yield systems of conservation laws for a set of "fluids" of droplet of various sizes, which is strongly coupled with the gas phase via source terms.

We derive a new optimal and flexible Two Size Moment MF method based on a family of polynomial reconstruction functions to describe the size distribution in the sections, which is second order accurate and particularly efficient at describing accurately the evolution of the size distribution with a moderate number of sections. An original work is also conducted in order to extend this approach to two-component droplets. For size moment MF methods, realizability of the moments is a crucial issue. Thus, we have developed innovative schemes for integrating source terms in moment conservation equations describing transport in phase space. This method enables the use of more representative aluminum droplet combustion models, and leads to more advanced studies of the distributed combustion zone. Moreover, for unsteady two-phase flow simulations, we have developed a robust and accurate coupling strategy between phases that are modeled by a fully Eulerian approach based on operator splitting in order to treat such spatial and temporal very multi-scale problems with reasonable computational time.

All the proposed developments have been carried out following two criteria : 1- an attractive cost/accuracy ratio for industrial simulations in the context of high fidelity simulations 2- a preservation of industrial code legacy. Verification of the models and methods have been conducted first using an in-house reseach code and then in the context of a two-phase acoustic study thus emphasizing the relevance of the splitting technique to capture accurately spray-acoustic interactions.

The new methods were then implemented and validated in the multi-physics platform CEDRE developed at ONERA. Solid propulsion simulations on realistic motor configurations have eventually underlined the maturity level reached by Eulerian methods to faithfully describe the dynamics of polydisperse sprays. The results of these simulations have highlighted the sensitivity of the instability levels depending on the size distribution of the aluminum droplets and aluminum oxide residues.

**Université Paris-Saclay**
Espace Technologique / Immeuble Discovery
Route de l'Orme aux Merisiers RD 128 / 91190 Saint-Aubin, France

# Remerciements

Je remercie chaleureusement mon directeur de thèse Marc Massot, ma co-directrice de thèse Frédérique Laurent et mon encadrant Joël Dupays pour m'avoir fait confiance jusqu'au bout et m'avoir soutenu, tout particulièrement au cours de ma dernière année. Je souligne le niveau d'excellence et la puissance de travail de Marc, la disponibilité et la gentillesse de Frédérique mais aussi son aisance à développer des méthodes numériques complexes même dans les transports en commun ! Encore merci à Joël pour tout ce que j'ai appris en propulsion solide, pour son côté humain et les conseils qu'il a pu me donner tant du point de vue professionnel que personnel.
Je remercie mes rapporteurs de thèse Eric Daniel et Daniel Réveillon pour leur courage face à ce manuscrit assez dense... Un grand merci aux membres du jury Vincent Giovangigli, Alain Merlen, Nathalie Cesco et Franck Godfroy.
Je souhaite aussi remercier Mohammed Habiballah, directeur du DEFA et Yves Fabignon chef de l'unité Propulsion Solide pour m'avoir accueilli au sein de leur entité et offert une formation de qualité au sein de l'ONERA.
Je remercie mes anciens collègues devenus amis : François Doisneau mon prédécesseur et soutien majeur au cours de ma thèse, je pense notamment à nos longues conservations scientifiques et débats philosophiques endiablés ; mon ami et pilote Angelo Murrone, aussi appelé le père Angelo, pour avoir encadré mes développements CEDRE à l'ONERA Châtillon et surtout pour avoir partagé mes choix musicaux ACDC et François Valéry "aimons nous vivant" entre 20h00 et 21h00 ; Emmanuel Montreuil pour m'avoir supporté dans son bureau, "je m'excuse Emmanuel pour t'avoir battu de trop nombreuses fois à nos blind tests du vendredi soir" ; le père Clément Le Touze mon fidèle co-doctorant qui m'a aidé à chambouler la structure de CEDRE ; Julien Troyes mon ami motard ; mes amis Lionel Tessé et Jean-Michel Lamet pour m'avoir appris la puissance de l'alumine ! Je n'oublie pas Aymeric Boucher, Nicolas Lupoglazoff, Emmanuel Radenac et Dimitri Davidenko avec qui j'ai eu le plaisir de travailler ou d'échanger.
Un immense merci à mes proches pour m'avoir supporté et pour leur patience. Je pense à ma mère toujours présente, ma grand-mère qui m'a aidé sur l'ensemble de mes études et qui nous a malheureusement quitté avant la fin de ma thèse et ma compagne qui était en première ligne à mes côtés.
Je souhaite pour finir un très bon courage à mes successeurs Macole et Valentin !

# Table des matières

**Nomenclature** **xxv**

**Introduction** **1**

**I Objectifs et problématiques des simulations diphasiques appliquées aux moteurs à propergol solide** **11**

**1 Contexte général de la propulsion solide et étude des instabilités de fonctionnement** **13**
1.1 La propulsion solide et ses domaines d'applications . . . . . 13
1.1.1 Principe de la propulsion fusée et les différentes catégories de moteurs . . . 13
1.1.1.1 Principe de base de la propulsion fusée . . . . . 13
1.1.1.2 Descriptif des moteurs-fusées . . . . . 13
1.1.1.3 Performances globales des moteurs-fusées . . . . . 15
1.1.2 Quelques éléments spécifiques à la propulsion solide . . . . . 16
1.1.2.1 Etude du propergol : formulation, morphologie et combustion . . . 16
1.1.2.2 Géométrie interne évolutive du moteur . . . . . 18
1.1.3 Applications et problèmes rencontrés en propulsion solide . . . . . 19
1.1.3.1 Les applications militaires . . . . . 19
1.1.3.2 Les applications civils . . . . . 20
1.1.4 Problèmes et axes de recherche majeurs . . . . . 22
1.1.4.1 Fiabilité et sécurité liées à la tenue mécanique des propergols . . . 22
1.1.4.2 Problématiques des instabilités moteur pour le MPS d'Ariane 5 . 22
1.1.4.3 Problèmes liés à la présence de particules dans l'écoulement . . . . 23
1.2 Etude des instabilités de l'écoulement interne . . . . . 24
1.2.1 Acoustique de la chambre et classification des instabilités . . . . . 24
1.2.2 Instabilités de combustion et réponse du propergol . . . . . 24
1.2.3 Mécanisme des instabilités aéroacoustiques . . . . . 25
1.2.3.1 Les Vortex Shedding, instabilités purement aérodynamiques . . . 25
1.2.3.2 Couplage aéroacoustique . . . . . 27
1.2.4 Quelques phénomènes interagissant avec les instabilités aéroacoustiques . . 29
1.2.4.1 Rôle de la turbulence . . . . . 29
1.2.4.2 Interactions fluide-structure . . . . . 29

**2 Enjeux et modélisation de la combustion des gouttes d'aluminium et impact sur les instabilités** **31**
2.1 Formation et propriétés de la phase condensée . . . . . 31
2.1.1 Oxydation des gouttes avant incorporation dans le propergol . . . . . 31
2.1.2 Agglomération des particules à la surface puis allumage . . . . . 32
2.1.3 Combustion en ambiance gaz de propergol . . . . . 33
2.1.4 Production des fumées et des résidus d'alumine et dispersion dans l'ensemble du moteur . . . . . 35
2.1.5 Position des travaux de thèse par rapport à la vie des gouttes d'$Al/Al_2O_3$ . 37
2.2 Rôle de la combustion distribuée sur les instabilités et enjeu d'un modèle de combustion représentatif . . . . . 39
2.2.1 Effets des résidus et de la combustion distribuée sur l'aéroacoustique de la chambre . . . . . 39
2.2.1.1 Impact des particules inertes sur l'écoulement interne d'un moteur 39

2.2.1.2 Influence des particules réactives sur la propagation d'une onde acoustique plane : Conséquence des transferts de masse . . . . . 40
2.2.1.3 Modification du Vortex Shedding en présence de particules en combustion . . . . . 42
2.2.2 Instabilité de nature thermoacoustique : Le phénomène ITHAC . . . . . 44
2.2.3 Facteurs déterminants pour l'étude de la zone de combustion distribuée . . 47
2.2.3.1 Approche de la distribution en taille des gouttes : Notion de polydispersion . . . . . 47
2.2.3.2 Importance de l'écoulement autour de la goutte et des conditions proche de la surface . . . . . 48
2.2.3.3 Représentativité de la combustion à l'échelle d'une goutte isolée . 48
2.3 Modélisation de la combustion d'une goutte d'$Al/Al_2O_3$ . . . . . 50
2.3.1 Etat de l'art de la modélisation des gouttes d'aluminium et contexte d'étude de la thèse . . . . . 50
2.3.2 Modélisation de l'évaporation et de la flamme de diffusion dans un milieu gazeux multiespèce . . . . . 52
2.3.3 Choix de la thermodynamique et de la géométrie de la goutte bicomposant 53
2.4 Présentation des modèles de combustion et améliorations . . . . . 55
2.4.1 Approche monoespèce : modèles existants avec prise en compte de la bicomposition . . . . . 55
2.4.1.1 Traitement séquentiel des phases de chauffage, d'allumage et de combustion . . . . . 55
2.4.1.2 Modèle ASSM basé sur la diffusion thermique . . . . . 56
2.4.1.3 Modèle en $d^n$ ou loi empirique ONERA . . . . . 56
2.4.1.4 Point d'amélioration : Prise en compte de la bicomposition de la goutte . . . . . 57
2.4.2 Approche biespèce globale : Nouveau modèle dit de "Diffusion" . . . . . 58

**3 Etat de l'art des modèles pour les écoulements diphasiques à phase dispersée 63**
3.1 Description et points clés des écoulements diphasiques . . . . . 63
3.1.1 Généralités : notion d'écoulements à phases séparées et à phase dispersée . 63
3.1.1.1 L'approche fluide-fluide DNS et la méthode de suivi d'interface . . 64
3.1.1.2 De la phase séparée à la phase dispersée : l'atomisation primaire . 65
3.1.2 Description des écoulements à phase dispersée et échelles caractéristiques . 66
3.1.2.1 Notions d'échelles et de taux de chargement . . . . . 66
3.1.2.2 Classification des régimes des écoulements à phase dispersée . . . 66
3.1.2.3 Interactions avec la phase gazeuse : notion de couplage fort ou "two-way coupling" et impact de la polydispersion en taille . . . . . 67
3.1.2.4 Notion de polydispersion en vitesse et croisements de trajectoires 69
3.1.2.5 Régimes rencontrés en propulsion solide . . . . . 70
3.2 Modélisation des écoulements à phase dispersée . . . . . 73
3.2.1 L'approche directe à l'échelle de la particule . . . . . 73
3.2.2 Le suivi de particules discrètes : la méthode DPS . . . . . 73
3.2.3 Description statistique du spray et approche cinétique : pertinence dans le contexte d'étude d'un MPS . . . . . 75
3.3 Equation cinétique couplée avec le gaz . . . . . 77
3.3.1 Présentation de l'équation cinétique de Williams-Boltzmann . . . . . 77
3.3.2 Equations de conservation pour la phase gazeuse . . . . . 77
3.3.2.1 Conservation de la masse et des espèces . . . . . 78
3.3.2.2 Conservation de la quantité de mouvement . . . . . 79
3.3.2.3 Conservation de l'énergie . . . . . 79
3.3.2.4 Quantités de référence et relations de base . . . . . 80
3.3.3 Le modèle Gaz Equivalent comme une approche monofluide globale . . . . 81
3.4 Modèles à l'échelle de la goutte pour la fermeture de l'équation WB . . . . . 83
3.4.1 Cas d'une goutte inerte . . . . . 83
3.4.1.1 Force de traînée . . . . . 83
3.4.1.2 Transfert de chaleur . . . . . 84
3.4.2 Cas d'une goutte en évaporation . . . . . 84
3.4.2.1 Evaporation contrôlée par la conductivité thermique . . . . . 84
3.4.2.2 Evaporation contrôlée par la diffusion des espèces . . . . . 84

**II Modélisation eulérienne des sprays réactifs polydisperses et bicomposants 87**

**4 Méthodes eulériennes pour les sprays polydisperses 89**
4.1 Description cinétique et approches eulériennes . . . 89
4.1.1 Résolution de l'équation cinétique . . . 89
4.1.1.1 Rappel de l'équation de WB pour les sprays réactifs . . . 89
4.1.1.2 Les méthodes lagrangiennes . . . 90
4.1.1.3 Choix de la résolution eulérienne . . . 90
4.1.2 Stratégies eulériennes basées sur des méthodes de moments . . . 91
4.1.2.1 Principe des méthodes de moments . . . 91
4.1.2.2 Dérivation du système semi-cinétique basé sur un conditionnement de la NDF par la variable taille . . . 92
4.1.2.3 Stratégies de discrétisation de l'espace des tailles . . . 93
4.1.3 Extension polydisperse de l'approche bifluide : La méthode Multi-Classe . . 94
4.2 Méthodes eulériennes Multi-Fluide ou sectionnelles . . . 96
4.2.1 Choix de modélisation pour l'étape semi-cinétique : les fermetures sur la distribution en vitesse . . . 96
4.2.1.1 Fermeture monocinétique et expression des systèmes de gaz sans pression . . . 96
4.2.1.2 Stratégie de traitement des croisements de trajectoires homo-PTC 96
4.2.2 Hiérarchie des méthodes Multi-Fluides à plusieurs moments en taille en approche monocinétique . . . 98
4.2.2.1 OSM . . . 98
4.2.2.2 TSM . . . 99
4.2.2.3 EMSM . . . 101
4.2.3 Choix de l'approche TSM-MF pour les applications propulsion solide . . . 102
4.2.3.1 Compromis coût/précision et flexibilité de la méthode à deux moments en taille . . . 102
4.2.3.2 Perspective d'amélioration sur les fermetures sectionnelles en vitesse 102

**5 Amélioration des méthodes TSM-MF et analyse de cette approche pour l'acoustique diphasique 105**
5.1 Méthodes à deux moments en taille . . . 105
5.1.1 Reconstruction exponentielle . . . 106
5.1.1.1 Présentation de la reconstruction . . . 106
5.1.1.2 L'étape d'inversion : Détermination des coefficients de la reconstruction à partir des moments d'ordre 0 et 3/2 . . . 106
5.1.2 Apports de la nouvelle reconstruction affine . . . 107
5.1.2.1 Principe d'une fonction affine par morceaux . . . 107
5.1.2.2 L'étape d'inversion : Avantage de la forme polynomiale par rapport à la forme exponentielle . . . 108
5.1.2.3 Comparaison des reconstructions affines et exponentielles sur différentes distributions en taille . . . 109
5.1.2.4 Intégration des termes intra-sectionnels : Rapidité et intégration analytique de la reconstruction affine . . . 110
5.1.3 Système diphasique complet . . . 112
5.2 Etude des méthodes MF pour l'acoustique polydisperse diphasique . . . 113
5.2.1 Cadre théorique d'un cas d'acoustique diphasique avec évaporation . . . 113
5.2.2 Relation de dispersion pour les milieux polydisperses : dérivation pour les méthodes MF . . . 113
5.2.3 Importance de la polydispersion sur la réponse acoustique . . . 114
5.2.4 Etude des stratégies de discrétisation en taille et des reconstructions sectionnelles pour l'acoustique diphasique . . . 115

**6 Extension des méthodes eulériennes pour la description des gouttes bicomposants 121**
6.1 Conditionnement par la composition massique de la goutte . . . 121
6.1.1 Limitations du conditionnement par la taille pour la combustion des gouttes bicomposants . . . 121
6.1.2 Nouvelle approche cinétique basée sur la composition de la goutte . . . 122

6.2 Le modèle Multi-Fluide bicomposant . . . 123
6.2.1 Passage à l'étape semi-cinétique . . . 123
6.2.2 Dérivation du modèle bicomposant . . . 123
6.2.2.1 Introduction des sections 2D pour le pavage de l'espace des masses 123
6.2.2.2 Reconstruction affine pour les sections 2D . . . 125
6.2.2.3 L'étape d'inversion : Calcul analytique des coefficients de la reconstruction à partir des moments d'ordre 0 et 1 . . . 126
6.2.3 Système MF bicomposant final . . . 126
6.2.3.1 Expression du terme source lié à la traînée . . . 127
6.2.3.2 Expression des termes sources d'échanges entre sections . . . 128
6.3 Méthode Multi-Classe bicomposant . . . 129
6.4 Méthode MF bicomposant simplifiée : conditionnement par la masse d'alumine $m_{ox}$ 130
6.4.1 Conditionnement de $m_{al}$ par $m_{ox}$ et modèle semi-cinétique . . . 130
6.4.2 Dérivation de la méthode MF bicomposant simplifiée . . . 131
6.4.2.1 Discrétisation de l'espace de la masse d'alumine . . . 131
6.4.2.2 Reconstruction affine . . . 132
6.4.3 Système MF bicomposant simplifié final . . . 132
6.4.3.1 Expression du terme source lié à la traînée . . . 133
6.4.3.2 Expression des termes sources d'échange avec le gaz et des flux entre sections pour l'espèce alumine . . . 133
6.4.3.3 Expression des termes sources d'échange avec le gaz et des flux entre sections pour l'espèce aluminium . . . 134
6.4.3.4 Système simplifié pour un cas de combustion sans condensation d'alumine . . . 134
6.4.3.5 Système dégénéré pour le traitement des résidus d'alumine après combustion . . . 135

**III Stratégies numériques pour les calculs instationnaires diphasiques réactifs en couplage fort 137**

**7 Méthodes numériques dédiées aux solveurs diphasiques eulériens 139**
7.1 Développement d'une stratégie de splitting d'opérateurs pour les problèmes diphasiques instationnaires . . . 139
7.1.1 Hiérarchie des échelles de temps rencontrées dans les MPS et objectifs pour les futurs calculs industriels . . . 140
7.1.2 Pertinence d'une méthode de splitting pour l'intégration en temps du système diphasique . . . 141
7.1.3 Décomposition en sous-systèmes . . . 143
7.1.3.1 Formalisme pour le cas bicomposant . . . 144
7.1.4 Intégration des opérateurs et ordres en temps . . . 145
7.1.4.1 Splitting convection/sources . . . 145
7.1.4.2 Splitting à deux étages : proposition d'un opérateur acoustique . . 145
7.2 Méthodes numériques de résolution spatiale . . . 147
7.2.1 Cahier des charges des méthodes numériques pour les codes CFD à vocation industrielle . . . 147
7.2.2 Résolution du transport de la phase gazeuse . . . 148
7.2.2.1 La discrétisation spatiale par une méthode de Volumes Finies . . . 148
7.2.2.2 Schémas classiques pour les maillages structurés . . . 149
7.2.2.3 Discussion sur les schémas d'ordre élevé et utilisation pour les maillages non structurés généraux . . . 151
7.2.3 Résolution du transport de la phase dispersée modélisée comme un fluide hypercompressible . . . 152
7.2.3.1 Schémas dédiés à la dynamique des gaz sans pression en maillages structurés . . . 152
7.2.3.2 Stratégie pour les maillages non structurés généraux . . . 153

**8 Développement de schémas d'intégration des termes sources réactifs pour les méthodes MF 155**
8.1 Stratégie numérique d'intégration des termes sources pour l'approche Multi-Fluide à deux moments en taille . . . 155

8.1.1 Contraintes numériques pour l'intégration des termes de flux entre sections 155
8.1.2 Dérivation du schéma SRST : "Simultaneous Reactive Source Term scheme" 156
8.1.3 Extension du schéma SRST pour le modèle MF bicomposant . . . . . 160
8.2 Schéma cinétique SKE dédié aux cas évaporatifs purs : "Sectional Kinetic Evaporation scheme" . . . . . 162
8.3 Vérifications 0D des nouveaux schémas d'intégration des termes sources sectionnels 164
8.3.1 Vérifications numériques des flux d'échange entre sections du schéma SRST 164
8.3.1.1 Etude analytique de l'évaporation des distributions polydisperses continues . . . . . 164
8.3.1.2 Loi d'évaporation constante . . . . . 165
8.3.1.3 Loi d'évaporation racine carré . . . . . 167
8.3.2 Vérification du schéma cinétique SKE . . . . . 168
8.3.2.1 Loi d'évaporation constante . . . . . 169
8.3.2.2 Loi d'évaporation racine carré . . . . . 169
8.3.3 Evaluation qualitative de la combustion des gouttes bicomposants avec la méthode MF bicomposant et son schéma SRST . . . . . 170

**9 Etudes numériques d'acoustique diphasique avec le code SAP1 175**
9.1 Développement du code de recherches SAP1 . . . . . 175
9.1.1 Objectifs et contexte d'étude . . . . . 175
9.1.2 Structure globale du code . . . . . 176
9.1.2.1 Méthodes eulériennes pour la description des phases . . . . . 176
9.1.2.2 Discussion sur le choix du pas de temps de splitting . . . . . 176
9.1.2.3 Schémas numériques pour les différents opérateurs . . . . . 176
9.2 Validations acoustiques diphasiques 1D de la stratégie de splitting . . . . . 177
9.2.1 Cas d'un spray inerte monocomposant . . . . . 177
9.2.1.1 Présentation de l'étude . . . . . 177
9.2.1.2 Résultats numériques pour un milieu diphasique au repos . . . . . 178
9.2.1.3 Résultats numériques pour un milieu diphasique en mouvement . 180
9.2.2 Cas d'un spray inerte bicomposant . . . . . 180
9.2.2.1 Présentation de l'étude . . . . . 180
9.2.2.2 Résultats numériques . . . . . 182
9.2.3 Cas d'un spray évaporant monocomposant . . . . . 182
9.2.3.1 Présentation de l'étude . . . . . 182
9.2.3.2 Résultats numériques et conclusion . . . . . 184
9.3 Analyse mathématique de l'erreur de splitting dans le contexte de l'acoustique diphasique linéaire . . . . . 185
9.3.1 Identification des systèmes différentiels "splittés" dans le cas d'un spray inerte mondisperse . . . . . 185
9.3.2 Hiérarchie de modèles couplés pour l'étude de l'erreur de splitting . . . . . 186
9.3.2.1 Le modèle à 1 équation . . . . . 186
9.3.2.2 Le modèle à 3 équations . . . . . 186
9.3.2.3 Le modèle à 5 équations . . . . . 187
9.3.3 Calculs des erreurs de splitting pour les différents modèles . . . . . 187
9.3.3.1 Etude analytique du modèle à 1 équation . . . . . 187
9.3.3.2 Etude analytique du modèle à 3 équations . . . . . 189
9.3.3.3 Etude numérique du modèle à 5 équations . . . . . 189
9.3.4 Conclusion sur l'erreur de splitting pour les systèmes linéaires . . . . . 191

**IV Simulations diphasiques réactives avec le code CEDRE 193**

**10 Contribution dans le code multi-physique CEDRE 195**
10.1 Présentation du code CEDRE . . . . . 195
10.1.1 Structure globale . . . . . 195
10.1.2 Stratégies numériques et spécificités de CEDRE . . . . . 196
10.2 Apports et implémentation des développements dans CEDRE . . . . . 198
10.2.1 Mise en place de la stratégie de splitting pour le couplage CHARME-SPIREE 199
10.2.2 Evolution de l'approche sectionnelle, calcul et intégration des termes sources 200
10.2.3 Contribution commune pour le couplage CHARME-SPIREE : étude de l'atomisation primaire en propulsion liquide . . . . . 201

**11 Etudes 1D des modèles de combustion des gouttes d'aluminium 207**
11.1 Etude des modèles de combustion avec la granulométrie P230 . . . 207
11.1.1 Etude de la zone de combustion . . . 208
11.1.1.1 Présentation de la configuration numérique . . . 208
11.1.1.2 Raffinement en maillage avec le modèle en $d^n$ . . . 209
11.1.2 Dynamiques de combustion en fonction du modèle . . . 211
11.1.3 Comparaison entre granulométries monodisperse et bidisperse avec le modèle de diffusion . . . 213
11.2 Etude de la combustion totale de gouttes monocomposants : utilisation de la granulométrie LP10 et du modèle ASSM . . . 215
11.2.1 Etude du raffinement de maillage . . . 215
11.2.2 Comparaison entre granulométries monodisperse et bidisperse . . . 217
11.2.3 Impact de la polydispersion : Monodale vs Monodisperse . . . 218

**12 Calculs diphasiques réactifs pour la validation de la méthode Multi-Fluide 223**
12.1 Cas test TEU évaporant pour la validation de la stratégie de splitting et de l'approche Multi-Fluide . . . 223
12.1.1 Détails de la configuration moteur et des mises en données numériques . . . 223
12.1.2 Comparaison des méthodes eulériennes et évaluation de l'intégration temporelle par splitting . . . 224
12.1.2.1 Validation de l'approche MF, du schéma SRST et gain en temps de calcul de la reconstruction affine . . . 224
12.1.2.2 Etude de la stratégie de splitting . . . 226
12.2 Calcul P230 avec combustion des gouttes : faisabilité de la méthode MF conditionnée en taille . . . 227
12.2.1 Rappel des points clés du moteur P230 . . . 227
12.2.2 Configuration numérique . . . 227
12.2.3 Etude de la combustion sur les instabilités moteur . . . 228
12.3 Calcul LP10 avec combustion complète des gouttes d'aluminium : Etude de la polydispersion . . . 231
12.3.1 Présentation de l'étude et de la configuration numérique pour la granulométrie 20$\mu$m . . . 231
12.3.2 Etude de l'écoulement et analyse fréquentielle pour la granulométrie 20$\mu$m . 233
12.3.3 Modifications sensibles des niveaux d'instabilités en fonction de la granulométrie . . . 234

**13 Calculs de démonstration P230 avec combustion des gouttes d'$Al/Al_2O_3$ 237**
13.1 Présentation des cas d'études et de la configuration numérique . . . 237
13.2 Etude de l'écoulement diphasique réactif . . . 240
13.2.1 Analyse de la zone de combustion distribuée . . . 240
13.2.2 Analyse de la structure de l'écoulement . . . 241
13.2.3 Etude fréquentielle et des niveaux d'instabilités . . . 244

**Conclusion 247**

**A Calculs intra-sectionnels des termes sources d'échanges avec le gaz 251**
A.1 Cas des particules inertes . . . 251
A.1.1 Calcul de la force de traînée . . . 251
A.1.1.1 Régime de stokes . . . 251
A.1.1.2 Régime de Schiller-Naumann . . . 251
A.1.2 Echange de chaleur . . . 251
A.1.2.1 Régime de stokes . . . 251
A.1.2.2 Régime de Schiller-Naumann . . . 251
A.2 Cas des particules réactives . . . 252
A.2.1 Evaporation contrôlée par la conductivité thermique . . . 252
A.2.2 Evaporation contrôlée par la diffusion des espèces . . . 254
A.2.3 Combustion des particules d'aluminium : modèle ASSM . . . 255
A.2.4 Combustion des particules d'aluminium : modèle "loi du $d^n$" . . . 256

**B Acoustique diphasique polydisperse 259**

B.1 Dérivation de la relation de dispersion polydisperse pour les gouttes évaporant dans leur propre vapeur . . . . . 259

**C Résultats calcul P230 du chapitre 13** **263**
C.1 Visualisation des champs de la phase gazeuse . . . . . 263
C.2 Visualisation des champs de la phase dispersée . . . . . 264

**D Contribution CICP** **267**

# Liste des tableaux


2.1 Résumé de l'évolution de la composition et de la granulométrie des gouttes au sein d'un MPS . . . 37
2.2 Coefficients du modèle en $d^n$ selon Beckstead [Beckstead, 2002] . . . 56
2.3 Exemples de grandeurs thermophysiques pour l'aluminium et l'alumine liquides à T=3000K . . . 57
2.4 Composition des deux espèces globales OX et PC . . . 58

3.1 Régimes inertiels des particules . . . 69

5.1 Propriétés du gaz et du liquide . . . 115

8.1 Conditions initiales et propriétés thermodynamiques . . . 170
8.2 Discrétisation MF bicomposant de l'espace des masses . . . 171
8.3 Données sur les distributions en masse . . . 171

9.1 Propriétés du gaz et des gouttes . . . 181
9.2 Répartitions en masses des sprays bicomposants monodisperse et polydisperse étudiés dans le cadre de l'étude d'acoustique diphasique inerte . . . 181
9.3 Discrétisation MF bicompsante de l'espace des masses . . . 181
9.4 Pas de temps $\Delta t_a$ fonction des fréquences acoustiques étudiées . . . 183
9.5 Récapitulatif des erreurs locales pour les différentes variables du modèle à 3 équations avec différentes stratégies de splitting . . . 190

11.1 Données des maillages 1D cartésien pour la configuration P230 . . . 208
11.2 Paramètres de calcul pour les modèles en $d^n$ et ASSM : Cas Bidisperse P230 . . . 209
11.3 Paramètres de calcul pour le modèle de diffusion : cas Bidisperse P230 . . . 211
11.4 Paramètres de calcul pour le modèle de diffusion : cas monodisperse P230 avec combustion instantanée des gouttes isolées . . . 213
11.5 Données des maillages 1D cartésien pour la configuration LP10 . . . 215
11.6 Paramètres de calcul pour le modèle ASSM : cas Bidisperse LP10 sans résidus (combustion complète des gouttes) . . . 216
11.7 Paramètres de calculs pour le modèle ASSM : cas Monodisperse LP10 sans résidus (combustion complète des gouttes) . . . 217
11.8 Conditions d'injection des gouttes pour l'approche monomodale avec plusieurs distributions lognormales réparties sur 3 sections . . . 218

12.1 Conditions d'injection des particules dans le cas TEU . . . 224
12.2 Temps de calcul globaux des simulations "fast" avec les méthodes MF et MC . . . 226
12.3 Comparaisons sur les amplitudes des instabilités et sur les pressions moyennes (valeurs adimensionnées) pour les différentes méthodes eulériennes . . . 229
12.4 Tableau récapitulation des calculs LP10 monophasique et diphasiques réactifs avec le modèle de combustion ASSM . . . 232
12.5 Pour la granulométrie 20$\mu$m, comparaisons des amplitudes des instabilités et des pressions moyennes (les valeurs des pressions et des fréquences sont adimensionnées par rapport à celles du calcul GE "ref") pour les configurations données en Tab.(12.4) et les deux pas de temps . . . 235
12.6 Comparaisons des amplitudes des instabilités et des pressions moyennes (les valeurs des pressions et des fréquences sont adimensionnées par rapport à celles du calcul GE "ref") pour les trois granulométries monodisperses avec la méthode MC et le pas de temps $\Delta t = 2.10^{-7}$s . . . 236

13.1 Tableau récapitulatif des calculs P230 diphasiques réactifs avec le modèle de combustion de diffusion . . . . . 239
13.2 Comparaisons sur les amplitudes relatives des instabilités et sur les pressions moyennes ainsi que les fréquences (valeurs adimensionnées par rapport au calcul GE) pour les différentes configurations données dans le Tab.(13.1) . . . . . 244

# Table des figures


1.1 Essai d'une fusée V2 à l'été 1943, quatre secondes après le décollage . . . . . 14
1.2 Schéma simplifié du fonctionnement d'un moteur à propergol solide . . . . . 15
1.3 Photographies au microscope à balayage électronique d'une coupe de propergol composite [Orlandi, 2002] . . . . . 17
1.4 Schéma de principe de la combustion d'un propergol PBHT/PA [Godon, 1983] . . 18
1.5 Différents profils de propergol à combustion radiale et courbes de poussée associées [Shafer, 1959] . . . . . 19
1.6 Tir du missile M51 depuis le sous-marin lanceurs d'engins Le Terrible ©DGA . . . 20
1.7 Lanceur Ariane 5 au décollage et lanceur VEGA rejoignant le pas de tir ©CNES . 20
1.8 Vue éclatée du moteur P230 ©HERAKLES et son schéma simplifié . . . . . 21
1.9 Signal de pression et fluctuations instantanées (gauche) et amplitude des instabilités pour les trois premiers modes acoustiques de l'EAP1 au cours d'un tir Ariane 5 ©ONERA [Prévost et al., 2013] . . . . . 22
1.10 Illustration du VSA . . . . . 26
1.11 Illustration du VSO . . . . . 26
1.12 Ecoulement de Taylor-Culick et apparition du VSP . . . . . 27
1.13 Spectre typique du VSP et son évolution selon la coordonnée longitudinale, résultats obtenus sur les montages en gaz froids ©Thèse T. Ferraille . . . . . 27
1.14 Bouclage aeroacoustique au sein d'un MPS ©Thèse J. Richard . . . . . 28
1.15 Glissement en fréquence des ODP obtenue par analyse de l'accéléromètre de l'EAP1 du tir 510 d'Ariane 5 et réseau de modes propres de l'écoulement ©Thèse F. Chedevergne [Chedevergne, 2007] . . . . . 28
1.16 Transition laminaire/turbulent et atténuation des structures tourbillonnaires . . . 29
1.17 Interactions corps du moteur / acoustique de la chambre ©Thèse J. Richard [Richard, 2012] . . . . . 30
1.18 Battement de la PT dans l'écoulement et génération de structures tourbillonnaires de type VSO . . . . . 30

2.1 Evolution de la fraction massique d'alumine $Y_{ox}$ pour une particule présentant une couche d'alumine de 3nm (Données du calcul : $\rho_{al} = 1500kg/m^3$ et $\rho_{ox} = 2700kg/m^3$ ) 32
2.2 Illustration de la technique de packing prenant en compte la structure hétérogène du propergol ©[Davidenko and Fabignon, 2013] . . . . . 33
2.3 Répresentation du lobe d'alumine selon Kuentzmann [Kuentzmann, 1973a] . . . . . 34
2.4 Schématisation des échanges de masse lors de la combustion d'une goutte micrométrique d'aluminium [Melcher et al., 2000; Chassagne, 2007] . . . . . 34
2.5 Particules isolées et agglomérats quittant la surface du propergol (à gauche) et combustion d'une goutte isolée (à droite) et son panache de fumées, la partie la plus claire de la goutte correspond au lobe d'alumine. Visualisation par strioscopie ©ONERA DEFA/Devillers 2013 . . . . . 35
2.6 Formation et caractéristiques de la phase condensée dans le cas de la Butalane du P230 [Fabignon et al., 2003b] . . . . . 35
2.7 Illustration de la coalescence de gouttes d'alumine dans le moteur P230 par simulations numériques [Doisneau, 2013] . . . . . 36
2.8 Exemple d'une distribution en taille bimodale pour des résidus d'alumine collectés sur le montage "Quench Bomb" [Gallier et al., 2013] . . . . . 36
2.9 Vie d'une particule d'aluminium ©ONERA DEFA/Dupays . . . . . 38
2.10 Illustration de la centrifugation des particules par les structures tourbillonnaires du VSP pour le montage LP10 ; visualisation de leur concentration massique . . . . . 40

2.11 Illustration d'une onde acoustique amplifiée dans un milieu gaz-gouttes (de $6\mu m$ caractérisées par un nombre de Stokes de 0.25) avec une évaporation pilotée par la diffusion thermique [Dupays and Vuillot, 2002] . . . . . 41
2.12 Atténuation $\alpha^*$ et dispersion $\beta^*$ d'une onde acoustique dans un milieu gaz+gouttes avec une évaporation pilotée par la diffusion des espèces ; études paramétriques sur le déséquilibre thermique $\Theta$ entre phases et sur la fraction massique $\kappa_{Fs}$ de l'espèce évaporante à la surface de la goutte [Dupays, 2002a] . . . . . 41
2.13 Atténuation $\alpha^*$ et dispersion $\beta^*$ d'une onde acoustique dans un milieu gaz+gouttes avec une évaporation pilotée par la diffusion thermique ; Distributions en taille type lognormale (courbes rouges continues) et monodisperse équivalent basée sur le calcul d'un diamètre moyen $r_{31}$ (courbes noires discontinues) [Sibra et al., 2014] . . . . . 42
2.14 Spectres fréquentiels des ODP pour la configuration moteur LP6 obtenus à partir de simulations en gaz seul (gauche) et avec prise en compte des gouttes en combustion : Cas d'une concentration massique de 6% de 30$\mu$m à 3$\mu$m (milieu) et cas d'une concentration massique de 6% de 125$\mu$m à 60$\mu$m (droite) [Lupoglazoff et al., 2002] 43
2.15 Visualisation des champs de vorticité pour la configuration moteur LP6 obtenus à partir de simulations avec des gouttes en combustion : Cas des gouttes de $30\mu m$ (haut) et cas des gouttes de $125\mu m$ [Dupays, 2002b] . . . . . 43
2.16 Spectres fréquentiels des ODP pour la configuration du moteur P230 à 95s obtenus à partir de simulations gaz seul (gauche) et avec prise en compte des gouttes de $125\mu m$ en combustion (droite) [Lupoglazoff et al., 2002] . . . . . 44
2.17 Zones d'amplification et d'atténuation pour un cas simplifié du tube de Rijke [Radenac, 2009] . . . . . 45
2.18 Vorticité caractérisant le phénomène ITHAC au sein du moteur P80 ©HERAKLES 46
2.19 Influence de la couche limite acoustique sur la vorticité dans la configuration moteur simplifiée TEP [Radenac, 2013] . . . . . 46
2.20 Exemple d'une distribution bimodale continue en taille des gouttes d'$Al$ et son approche discrète basée sur les modes de la répartition . . . . . 47
2.21 Compilation de données expérimentales des temps de combustion des gouttes isolées d'aluminium et des lois de régression associées. Les références figurant dans le diagramme sont données dans [Huang et al., 2007] . . . . . 51
2.22 Illustrations des différents modèles de flamme et d'interfaces : a) Pas de flamme, b) Flamme mince et cinétique infiniment rapide et c) Flamme épaissie et cinétique finie [Dupays, 2009] . . . . . 53
2.23 Modèle géométrique pour le lobe d'alumine d'une goutte d'aluminium oxydée [Sibra et al., 2013] . . . . . 55
2.24 Schéma de principe du modèle de diffusion . . . . . 59

3.1 Visualisation de l'atomisation primaire d'un jet liquide et production d'un spray polydisperse ©CORIA/Dumouchel . . . . . 65
3.2 Trajectoires des particules fonction de leur nombre de Stokes $St$ au sein de structures tourbillonnaires se développant au niveau d'une couche de mélange [Crowe et al., 1998] . . . . . 68
3.3 Carte des régimes des interactions entre le spray et le gaz en fonction de la fraction volumique de la phase dispersée pour décrire le couplage de la quantité de mouvement [Elghobashi, 1994] . . . . . 68
3.4 Régimes d'écoulements d'une phase dispersée ©Doisneau . . . . . 70
3.5 Grandeurs caractéristiques de la phase dispersée au sein d'un moteur à propergol solide, exemple du P230 . . . . . 71
3.6 Simulation DPS d'un croisement de quatre jets de particules avec prise en compte d'un modèle de collision élastique [Thomine, 2011] . . . . . 74

4.1 Illustration de la méthode Multi-Classe . . . . . 94
4.2 Simulation d'un croisement de particules de même taille dans le cas $Kn = +\infty$ pour illustrer un cas d'homo-PTC à grande échelle. En haut-gauche : QMOM avec des moments d'ordre 0 et 3, en haut-droit : Gaussien Anisotrope, en bas-gauche : Gaussien Isotrope et en bas-droite : Monocinétique ©Doisneau . . . . . 97
4.3 Régimes de la phase dispersée fonction de la granulométrie communément rencontrée en propulsion solide ©Doisneau . . . . . 98
4.4 Illustration de la méthode MF à un moment en taille OSM . . . . . 99
4.5 Illustration de la méthode MF à deux moments en taille TSM . . . . . 100

4.6 Illustration de la méthode EMSM à quatre moments en taille, description de la distribution avec une seule section. Ligne continue : distribution exacte et ligne discontinue : distribution reconstruite . . . 101
4.7 Visualisation de la concentration de particules injectées de manière pariétale dans un écoulement gazeux. Comparaison de la méthode OSM-MF et un moment en vitesse avec 10 sections (en haut) et CSVM à quatre moments en taille et deux en vitesse (en bas) . . . 103
4.8 Profil de vitesse dans les sections en fonction de l'hypothèse mono-vitesse ou l'approche CSVM . . . 103

5.1 Tracé de l'inverse de la fonction $g_k$ et de ses limites . . . 106
5.2 Reconstruction exponentielle pour des cas de distributions raides (à gauche et à droite) et pour une reconstruction étendue (au milieu) . . . 107
5.3 Situations possibles pour la reconstruction affine respectant les conditions de réalisabilité . . . 107
5.4 Distributions initiales utilisées pour comparer numériquement l'approche affine et exponentielle . . . 110
5.5 Erreur illustrée par la norme $L^2$ pour les reconstructions affine (à gauche) et exponentielle (à droite) . . . 110
5.6 Evolution dans l'espace des tailles de la NDF reconstruite avec la méthode TSM affine due à de l'évaporation (loi d'évaporation arbitraire) et illustration des flux entre sections et des échanges avec le gaz en couplage fort . . . 111
5.7 Illustration du comportement des particules au passage d'une perturbation acoustique ©Doisneau . . . 113
5.8 NDF pour les distributions lognormale et monodisperse de rayon $r_{31}$ équivalent (à gauche) / (à droite) MDF correspondants aux NDF (MDF=$4/3\pi r^3$NDF) : Distribution lognormale: - - -; Distribution Dirac (amplitude arbitraire): —— . 115
5.9 Dispersion $\beta^*$ (en haut) et atténuation $\alpha^*$ (en bas) d'une onde acoustique dans un milieu diphasique: Ligne continue : Distribution lognormale et ligne discontinue : Distribution monodisperse avec $r_{31}$ équivalent. Résultats pour deux chaleurs latentes : à gauche: $L_{v,1}$, à droite: $L_{v,2}$ . . . 116
5.10 Dispersion $\beta^*$ et atténuation $\alpha^*$ d'une onde acoustique dans un milieu diphasique évaporant avec une distribution lognormale pour le spray ; les propriétés du milieu sont données dans Tab.(5.1) avec $L_v = 5.10^{-6}$ J/kg. Résultats pour la réponse acoustique polydisperse exacte : Ligne continue — et l'approche MF avec 2, 4, 8 et 12 sections et la discrétisation en taille $\Delta r = cst$ et la distribution approchée $\kappa(r) = cst$ : Ligne discontinue - - - - . . . 116
5.11 Dispersion $\beta^*$ et atténuation $\alpha^*$ d'une onde acoustique dans un milieu diphasique évaporant avec une distribution lognormale pour le spray ; les propriétés du milieu sont données dans Tab.(5.1) avec $L_v = 5.10^{-6}$ J/kg. Résultats pour la réponse acoustique polydisperse exacte : Ligne continue — et l'approche MF avec 2, 4, 8 et 12 sections et la discrétisation en taille $\Delta r = cst$ et la distribution exacte $n_0(r)$ : Ligne discontinue - - - - . . . 117
5.12 Dispersion $\beta^*$ et atténuation $\alpha^*$ d'une onde acoustique dans un milieu diphasique évaporant avec une distribution lognormale pour le spray ; les propriétés du milieu sont données dans Tab.(5.1) avec $L_v = 5.10^{-6}$ J/kg. Résultats pour la réponse acoustique polydisperse exacte : Ligne continue — et l'approche MF avec 2, 4, 8 et 12 sections et la discrétisation en taille $\Delta m = cst$ et la distribution approchée $\kappa(r) = cst$ : Ligne discontinue - - - - . . . 118
5.13 Dispersion $\beta^*$ et atténuation $\alpha^*$ d'une onde acoustique dans un milieu diphasique évaporant avec une distribution lognormale pour le spray ; les propriétés du milieu sont données dans Tab.(5.1) avec $L_v = 5.10^{-6}$ J/kg. Résultats pour la réponse acoustique polydisperse exacte : Ligne continue — et l'approche MF avec 2, 4, 8 et 12 sections et la discrétisation en taille $\Delta m = cst$ et la distribution exacte $n_0(r)$ : Ligne discontinue - - - - . . . 119

6.1 Discrétisation de l'espace des masses et illustration des flux entre sections dans le cas de l'évaporation de l'aluminium . . . 124
6.2 Reconstructions affines dans l'espace des phases de la composition massique . . . 125
6.3 Situations possibles pour la reconstruction affine avec les moments d'ordre 0 et 1 respectant les conditions de réalisabilité . . . 126

6.4 Discrétisation dans l'espace des masses pour la méthode Multi-Classe bicomposant 129
6.5 Principe de base pour la construction de la méthode MF bicomposant simplifée : conditionnement par la masse d'alumine (en haut) et cas multi-valué qui est à éviter (en bas) . . . 130
6.6 Illustration de la reconstruction affine pour la méthode MF bicomposant simplifiée avec l'hypothèse d'une valeur constante de la masse d'aluminium par section. . . . 133

7.1 Hiérarchie des échelles de temps dans la simulation diphasique des instabilités de fonctionnement des longs MPS . . . 140
7.2 Relaxation 0D des vitesses du gaz et d'un spray monodisperse vers une valeur d'équilibre, cas d'un rapport massique égal à 1 entre les deux phases. A gauche, calcul de l'évolution des variables avec un pas de temps égal à $\tau_{min}$ et à droite avec un pas de temps deux fois plus grand . . . 141
7.3 Valeurs moyennes de la solution pour la méthode Godunov . . . 149
7.4 Valeurs moyennes de la solution pour la méthode MUSCL . . . 150

8.1 Principe du schéma SRST illustré avec la reconstruction affine . . . 157
8.2 Principe du schéma SRST pour la méthode MF bicomposant sans prise en compte de la rétrodiffusion d'alumine . . . 161
8.3 Application du schéma SRST bicomposant dans le contexte d'un splitting directionnel dans l'espace des masses à deux dimensions ; L'étape (1) correspond à l'évaporation de l'aluminium et l'étape (2) à la condensation de l'alumine . . . 161
8.4 Illustration d'un problème de Riemann pour le schéma SKE, situation de création de vide : $K^{(k)} > K^{(k+1)}$ . . . 163
8.5 Illustration d'un problème de Riemann pour le schéma SKE, situation de choc : $K^{(k)} < K^{(k+1)}$ . . . 163
8.6 Evolution temporelle des erreurs sur les concentrations totales en nombre et en masse rapportées à leurs valeurs initiales. Configuration avec 5 sections et une discrétisation $\Delta S$ constante : —-: $\Delta t_1 = 2.10^{-4}$s ou CFL $= 0.1$ ○–○: $\Delta t_2 = 2.10^{-5}$s ou CFL $= 0.01$ ▽–▽: $\Delta t_3 = 2.10^{-7}$s ou CFL $= 1.10^{-4}$ . . . 166
8.7 Evolution temporelle des erreurs sur les concentrations totales en nombre et en masse rapportées à leurs valeurs initiales. Configuration avec 5 sections et une discrétisation $\Delta r$ constante : —-: $\Delta t_1 = 2.10^{-4}$s ○–○: $\Delta t_2 = 2.10^{-5}$s ▽–▽: $\Delta t_3 = 2.10^{-7}$s . 166
8.8 Evolution temporelle des erreurs sur les concentrations totales en nombre et en masse rapportées à leurs valeurs initiales. Configuration avec une discrétisation $\Delta r$ constante et $\Delta t_2 = 2.10^{-5}$s: ▽–▽: 5 sections ; ○–○ 10 sections ; —-: 20 sections 166
8.9 Gauche : Discrétisation de la loi racine carré avec 5 sections et une discrétisation $\Delta S$ constante / Droite : Tracé de la NDF à $t = 0$s et à $t = 2.210^{-3}$s pour la reconstruction affine : Ligne discontinue ; Solution analytique : Ligne continue . . 167
8.10 Evolution temporelle des erreurs sur les concentrations totales en nombre et en masse rapportées à leurs valeurs initiales. Configuration avec une discrétisation $\Delta S$ constante et $\Delta t = 2.10^{-5}$s : ▽–▽ : 5 sections ; ○–○ 10 sections ; —-: 20 sections 167
8.11 Gauche : Discrétisation de la loi racine carré avec 5 sections et une discrétisation $\Delta r$ constante / Droite : Tracé de la NDF à $t = 0$s et à $t = 2.210^{-3}$s pour la reconstruction affine : Ligne discontinue ; Solution analytique : Ligne continue . . 168
8.12 Evolution temporelle des erreurs sur les concentrations totales en nombre et en masse rapportées à leurs valeurs initiales. Configuration avec une discrétisation $\Delta r$ constante et $\Delta t = 2.10^{-5}$s: ▽–▽ : 5 sections ; ○–○ 10 sections ; —-: 20 sections 168
8.13 Evolutions temporelles des concentrations en masse (en haut) et en nombre (en bas) ; Résultats CEDRE : ○, SAP1 : ▽, erreurs avec SAP1 :- -, Solution analytique :**Ligne continue** . . . 169
8.14 Evolution temporelle de la NDF à t=0s et à t=$2.5\,10^{-5}$s / SAP1 :▽, Solution analytique : **Ligne continue** . . . 170
8.15 Evolutions temporelles de la température et de la densité locale du gaz pour la configuration monodisperse —: sans modèle de calotte, – –: avec modèle de calotte 171
8.16 Evolutions temporelles de la surface des gouttes et de la concentration massique totale du spray pour la configuration monodisperse —: sans modèle de calotte, – –: avec modèle de calotte . . . 172
8.17 Evolutions temporelles de la température du gaz et de la concentration massique totale du spray pour la configuration polydisperse —: sans modèle de calotte, – –: avec modèle de calotte . . . 172

9.1 Tracé des temps caractéristiques en fonction du diamètre des gouttes : **Ligne continue**: Temps de la phase gazeuse $\tau_g$ correspond à un CFL unitaire ; Ligne discontinue: Temps de relaxation des gouttes $\tau_{min}$ ; Red: Pas de temps $\Delta t_a$ préconisé pour le splitting à deux étages avec $K_g = K_p = 0.5$. . . . . 177
9.2 Simulation SAP1 de la propagation d'une onde acoustique dans un milieu diphasique au repos pour une distribution en taille monodisperse avec $St_{acou} = 20$ et $\mu_p = 0.106$. Légende : $-$: variables du gaz et $-+-$: variables de la phase dispersée. . . . . 178
9.3 Atténuation et dispersion d'une onde acoustique plane dans un milieu diphasique composé d'un spray monodisperse inerte présentant un taux de chargement $\mu_p = 0.106$ pour différents pas de temps (code SAP1 utilisant $K_p = 0.25$) : $-$: Solution analytique ; $+$: $K_g = 2$ ; $\circ$: $K_g = 1$ ; $\Delta$: $K_g = 0.9$ ; $\square$: $K_g = 0.5$ ; $\nabla$: $K_g = 0.2$. . . 179
9.4 Convection d'une concentration spatiale de gouttes de type fenêtre avec un pas de temps piloté par l'acoustique (convection de la structure 30m/s, schéma de Bouchut d'ordre 2, code SAP1) : Ligne continue : Solution initiale ; $+$: Solution numérique pour un $\mathrm{CFL}^{(k)}_{conv} = 0.081$ ; $\times$: Solution numérique pour un $\mathrm{CFL}^{(k)}_{conv} = 0.94$. . . . 179
9.5 Simulation de la propagation d'une perturbation acoustique dans un milieu diphasique en mouvement constitué d'un spray monodisperse inerte présentant un taux de chargement $\mu_p = 0.106$. Présentation des variables du gaz à trois instants (La structure acoustique initiale correspond aux trois périodes d'onde au centre du domaine). . . . . 180
9.6 Atténuation d'une perturbation acoustique (trois périodes d'onde) dans un milieu diphasique en mouvement constitué d'un spray monodisperse inerte présentant un taux de chargement $\mu_p = 0.106$. **Ligne continue**: Solution analytique ; $\square$: Résultats SAP1 avec $K_g = 0.9$. . . . . 181
9.7 Atténuation et dispersion d'une onde acoustique pour deux distributions bicomposantes inertes : $-$: Solution analytique du spray monodisperse ; $--$: Solution analytique du spray polydisperse $\Delta$: résultats SAP1 . . . . . 182
9.8 Dispersion $\beta^*$ et atténuation $\alpha^*$ d'une onde acoustique dans un milieu diphasique évaporant avec une distribution lognormale pour le spray monocomposant. Configuration avec 8 sections et la chaleur latente $L_{v,1}$ : Ligne continue : Solution analytique ; $\square$ $\Delta t_{a,1} = 5.10^{-5}$s; $\nabla$: $\Delta t_{a,2} = 8.10^{-5}$s; $\circ$: $\Delta t_{a,1} = \Delta t_{a,2}$ comme fourni dans le Tab.(9.4) . . . . . 183
9.9 Dispersion $\beta^*$ et atténuation $\alpha^*$ d'une onde acoustique dans un milieu diphasique évaporant avec une distribution lognormale pour le spray composant. Configuration avec 8 sections et la chaleur latente $L_{v,2}$ : Ligne continue : Solution analytique ; $\square$ $\Delta t_{a,1} = 5.10^{-5}$s; $\nabla$: $\Delta t_{a,2} = 8.10^{-5}$s; $\circ$: $\Delta t_{a,1} = \Delta t_{a,2}$ comme fourni dans le Tab.(9.4) . . . . . 183
9.10 Ordres des erreurs globales calculées à partir d'une norme $\mathrm{L}^2$ sur les variables $u_p$ (à gauche) et $T_p$ (à droite). Résultats pour le splitting de Lie $\mathcal{T}^t\mathcal{R}^tQ_0$ : $\circ$, pour le splitting de Lie $\mathcal{R}^t\mathcal{T}^tQ_0$ : $\Delta$ et pour le splitting de Strang : $\square$ . . . . . 190
9.11 Ordres des erreurs globales calculées à partir d'une norme $\mathrm{L}^2$ sur les variables $u_g$ (à gauche) et $T_g$ (à droite). Résultats pour le splitting de Lie $\mathcal{T}^t\mathcal{R}^tQ_0$ : $\circ$, pour le splitting de Lie $\mathcal{R}^t\mathcal{T}^tQ_0$ : $\Delta$ et pour le splitting de Strang : $\square$ . . . . . 191

10.1 Environnement logiciel du code CEDRE . . . . . 196
10.2 Etude de la scalabilité du code CEDRE [Vuillot and Refloch, 2014] . . . . . 197
10.3 Evolution du solveur phase dispersée eulérien SPIREE entre les versions 4.1 et 5.1 de CEDRE . . . . . 198
10.4 Nouvelle intégration temporelle avec une stratégie de splitting d'opérateurs dans la routine de cycle en temps de CEDRE, exemple avec un splitting de Lie . . . . . 199
10.5 Principe général de la routine Sources pour les échanges CHARME-SPIREE pour les méthodes MF exponentielle et affine et les différents schémas d'intégration temporelle 201
10.6 Stratégie globale du transfert de gouttes atomisées de CHARME vers SPIREE pour la méthode MF affine . . . . . 202
10.7 Intégration de l'opérateur d'atomisation primaire dans la stratégie de splitting au sein du cycle d'avancement en temps du code CEDRE . . . . . 204
10.8 Champs des fractions volumiques pour la phase d'oxygène liquide dans CHARME et pour les trois sections décrivant la phase dispersée atomisée. Calcul diphasique inerte de la configuration du banc Mascotte [Le Touze, 2015] . . . . . 204

11.1 Visualisation de la configuration 1D et du maillage A utilisé pour le calcul bidisperse de la configuration P230 et le modèle en $d^n$ . . . . . 208
11.2 Evolution spatiale du diamètre des gouttes isolées (à gauche) et des agglomérats (à droite) pour le modèle de combustion $d^n$ et la configuration P230. Résultats pour les maillages A : $-\times-$, B : $-\circ-$, C : $-\nabla-$ et D : $-\Delta-$ . . . . . 210
11.3 Evolution spatiale de la température du gaz pour le modèle en $d^n$ et la configuration P230. Résultats pour les maillages A : $-\times-$, B : $-\circ-$, C : $-\nabla-$ et D : $-\Delta-$ . . 210
11.4 Evolution spatiale du diamètre des gouttes isolées (à gauche) et des agglomérats (à droite) pour la configuration P230. Résultats pour le modèle ASSM : $-\square-$, en $d^n$ : $-\times-$ et de diffusion : $-\circ-$ . . . . . 211
11.5 Evolution spatiale de la température du gaz sur le domaine (en haut) et zoom au niveau de l'injection (en bas) pour la configuration P230. Résultats pour le modèle ASSM : $-\square-$, en $d^n$ : $-\times-$ et de diffusion : $-\circ-$ . . . . . 212
11.6 Evolution spatiale du diamètre des agglomérats pour la configuration P230. Résultats pour la distribution bidisperse : $-\circ-$ et la distribution monodisperse : $-\nabla-$ 213
11.7 Evolution spatiale de la température du gaz sur le domaine (en haut) et zoom au niveau de l'injection (en bas) pour la configuration P230. Résultats pour la distribution bidisperse : $-\circ-$ et la distribution monodisperse : $-\nabla-$ . . . . . 214
11.8 Evolution spatiale de la température du gaz pour le modèle de combustion ASSM. Résultats pour les maillages A : $-\times-$, B : $-\circ-$, C : $-\nabla-$ et D : $-\Delta-$ . . . . . 216
11.9 Evolution spatiale du diamètre des gouttes isolées (à gauche) et des agglomérats (à droite) pour le modèle de combustion ASSM. Résultats pour les maillages A : $-\times-$, B : $-\circ-$, C : $-\nabla-$ et D : $-\Delta-$ . . . . . 217
11.10Evolution spatiale du diamètre des agglomérats pour la configuration LP10. Résultats pour la distribution bidisperse : $-\circ-$ et la distribution monodisperse : $-\nabla-$ 218
11.11Evolution spatiale de la température du gaz au niveau de l'injection pour la configuration P230. Résultats pour la distribution bidisperse : $-\circ-$ et la distribution monodisperse : $-\nabla-$ . . . . . 218
11.12Illustration des 3 cas monomodaux de type lognormale ayant le même mode $d = 20\mu$m 219
11.13Evolution spatiale de la température du gaz pour la configuration LP10. Résultats pour la distribution monodisperse : $-\times-$, la distribution Monomodale 1 : $-\circ-$, la distribution Monomodale 2 : $-\nabla-$ et la distribution Monomodale 3 : $-\Delta-$ . . . 219
11.14Evolution spatiale de la concentration massique totale de la phase dispersée pour la configuration LP10. Résultats pour la distribution monodisperse : $-\times-$, la distribution Monomodale 1 : $-\circ-$, la distribution Monomodale 2 : $-\nabla-$ et la distribution Monomodale 3 : $-\Delta-$ . . . . . 220

12.1 La configuration TEU : un maillage structuré-déformé avec injection axiale de gaz et de particules au fond avant . . . . . 224
12.2 Comparaisons entre les différentes méthodes eulériennes pour la simulation "fast" : MC (en haut) ; MF affine (au milieu) ; MF exponentielle (en bas). Champs instantanés pour l'enthalpie totale du gaz (à gauche) et pour la fraction volumique totale de l'ensemble des tailles de gouttes (à droite) . . . . . 225
12.3 Comparaisons entre les simulations "fast" et "ref" : coupe axiale A-A (en haut) et coupe radiale R-R (en bas). Résultats pour la méthode MC : ——: "ref" ; $\nabla$: "fast". Résultats pour la méthode MF affine : $-\,-\,-$: "ref" ; $\circ$: "fast" . . . . . 225
12.4 Configuration P230 et sa décomposition en 32 domaines, et illustration par des flèches de la surface d'injection du gaz et des gouttes . . . . . 227
12.5 Discrétisation spécifique de l'espace des tailles pour la mise en données du modèle MF avec combustion des gouttes . . . . . 228
12.6 Résultats pour la méthode MF affine : champs instantanés de la fraction volumique des résidus d'alumine pour les tailles $d_{1,res}$ (en haut) et $d_{2,res}$ (en bas) . . . . . 228
12.7 Comparaisons entre les méthodes MC et MF affine : étude de la coupe radiale R-R au sein de l'épaisseur de la combustion distribuée. Résultats pour la méthode MC : —$\nabla$— et pour la méthode MF affine : —$\circ$— . . . . . 229
12.8 FFT (échelles logarithmiques) des signaux de pression pour les capteurs S1 (à gauche) et S2 (à droite). Résultats pour les méthodes MC : $-\,-\,-$ et MF affine : — . . . . . 230
12.9 Maillage structuré-déformé de la configuration LP10. Vue globale du moteur et position des capteurs (en haut), vue du fond arrière et de la tuyère (au milieu) et vue de la fin du second segment de propergol (en bas) . . . . . 231

12.10Distributions monodisperse et monomodale lognormale avec un mode $d = 20\mu$m (maximum de la concentration massique) . . . . . 232
12.11Champs instantanés de la fraction volumique de la phase dispersée (en haut) et de la température du gaz (en bas). Configuration MC (à gauche) et MF (à droite) pour le calcul référence $\Delta t = 2\,10^{-7}$s . . . . . 233
12.12Champs instantanés de la norme du rotationnel. Configurations GE (en haut), MC (au milieu) et MF (en bas) pour le cas référence $\Delta t = 2.10^{-7}$s . . . . . 234
12.13Evolutions spatiales de la température du gaz (à droite) et du diamètre (à gauche) sur un maillage avec $\Delta X$=100$\mu$m. Calcul 1D de la combustion des gouttes de 10$\mu$m. Les symboles représentent les valeurs aux centres des cellules du maillage . . . . . 235

13.1 Maillage hybride de la configuration P230 à t=87s. Zoom sur le segment S2 (en bas) et le segment S3 (en haut) . . . . . 238
13.2 Maillage hybride au niveau de la fin du segment S2 (à gauche) et de la PT (à droite) 238
13.3 Champs instantanés de la température du gaz (en haut) et des diamètres des gouttes isolées (au milieu) et des agglomérats (en bas) pour la configuration Bidisperse2. Visualisation de la zone de combustion au début du segment S3 . . . . . 240
13.4 Evolution spatiale du diamètre des agglomérats pour les configurations Mono+Inerte : $-\circ-$ et Bidisperse2 : $-\Delta-$. Coupe dans la zone de combustion effectuée au milieu du segment S3 . . . . . 241
13.5 Evolution spatiale de la température du gaz pour les configurations Mono+Inerte : $-\circ-$ et Bidisperse2 : $-\Delta-$. Coupe dans la zone de combustion effectuée au milieu du segment S3 . . . . . 241
13.6 Champs instantanés de la norme du rotationnel. Configurations Bidisperse2 (en haut) et GE (en bas). Zoom sur le segment S2 du P230 . . . . . 241
13.7 Champs instantanés de la norme du rotationnel. Configurations bidisperse2 (en haut) et GE (en bas). Zoom sur le segment S3 du P230 . . . . . 242
13.8 Champs instantanés des fractions volumiques des gouttes isolées (en haut) et des agglomérats (en bas). Configuration Bidisperse2, zoom sur le segment S3 du P230 243
13.9 Spectres fréquentiels des capteurs du fond arrière FAR (à gauche) et fond avant FAV (à droite). Résultats pour les configurations GE : $---$, Mono+Inerte : $-\circ-$ et Bidisperse2 : $-\Delta-$ . . . . . 244
13.10Signaux de pression des capteurs au fond arrière FAR (en haut) et au fond avant FAV (en bas). Résultats pour les configurations GE : $---$, Mono+Inerte : $-\circ-$, Bidisperse : $-+-$ et Bidisperse2 : $-\Delta-$ . . . . . 245

C.1 Champs instantanés de la norme du rotationnel. Visualisation au niveau de la PTF pour les configurations Bidisperse2 (en haut) et GE (en bas) . . . . . 263
C.2 Champ instantané de la fraction massique de l'espèce OX. Visualisation au niveau du bloc S3 pour la configuration Bidisperse2 . . . . . 263
C.3 Champ instantané de la température du gaz. Visualisation au niveau du bloc S3 pour les configurations Bidisperse2 (en haut) et GE (en bas) . . . . . 263
C.4 Champs instantanés de la fraction volumique des gouttes. Visualisations des résidus de 3$\mu$m (en haut) et des résidus de 60$\mu$m (en bas) pour la configuration Bidisperse2 264
C.5 Champs instantanés de la fraction volumique des résidus de 3$\mu$m. Visualisation au niveau du bloc S3 pour les configurations Mono+Inerte (en haut) et Bidisperse2 (en bas) . . . . . 264
C.6 Champs instantanés de la fraction volumique des résidus de 3$\mu$m. Visualisation au niveau de la PTF pour les configurations Mono+Inerte (à gauche) et Bidisperse2 (à droite) . . . . . 264
C.7 Champs instantanés de la fraction volumique des résidus de 3$\mu$m De haut en bas : 6 instants successifs d'une période d'instabilités . . . . . 265
C.8 Champs instantanés de la fraction volumique des résidus de 60$\mu$m. De haut en bas : 6 instants successifs d'une période d'instabilités . . . . . 265

# Nomenclature

## Indices

| | | | |
|---|---|---|---|
| $g$ | Gaz | $sat$ | Saturation |
| $l$ | Liquide | $al$ | Aluminium |
| $p$ | Particule/goutte | $ox$ | Alumine |
| $ref$ | Référence | | |

## Lettres latines

**Pour la phase gaseuse :**

| | | |
|---|---|---|
| $Y_i$ | Fraction massique de l'espèce $i$ | s.d. |
| $\mathbf{u_g}$ | Vecteur vitesse | $\mathrm{m.s^{-1}}$ |
| $T_g$ | Température | K |
| $h_g$ | Enthalpie massique | $\mathrm{J.kg^{-1}}$ |
| $e_g$ | Energie interne massique | $\mathrm{J.kg^{-1}}$ |
| $E_g$ | Energie totale massique | $\mathrm{J.kg^{-1}}$ |
| | | |
| Pr | Nombre de Prandtl | s.d. |
| Kn | Nombre de Knudsen | s.d. |
| Oh | Nombre d'Ohnesorge | s.d. |
| We | Nombre de Weber | s.d. |
| Sh | Nombre de Sherwood | s.d. |
| Sc | Nombre de Schmidt | s.d. |
| Le | Nombre de Lewis | s.d. |
| $M$ | Nombre de Mach | s.d. |
| $Re$ | Nombre de Reynolds | s.d. |
| | | |
| $\mathcal{M}$ | Masse molaire | $\mathrm{kg.mol^{-1}}$ |
| $R$ | Constante des gaz parfaits | $\mathrm{J.mol^{-1}.K^{-1}}$ |
| $r_g$ | Constante du gaz | $\mathrm{J.kg^{-1}.K^{-1}}$ |
| $c_{p,g}$ | Capacité calorifique massique à pression constante | $\mathrm{J.kg^{-1}.K^{-1}}$ |
| $c_{v,g}$ | Capacité calorifique massique à volume constant | $\mathrm{J.kg^{-1}.K^{-1}}$ |
| $\mathrm{D}_i$ | Coefficient de diffusion de l'espèce $i$ | $\mathrm{m^2.s^{-1}}$ |
| | | |
| $c_0$ | Vitesse du son | $\mathrm{m.s^{-1}}$ |
| $f_{req}$ | Fréquence | $\mathrm{s^{-1}}$ |
| $\underline{k}$ | Nombre d'onde complexe | $\mathrm{rad.m^{-1}}$ |

**Pour la phase dispersée :**

| | | |
|---|---|---|
| $d$ | Diamètre de la particule | m |
| $r$ | Rayon de la particule | m |
| $S$ | Surface de la particule | $\mathrm{m^2}$ |
| $m_p$ | Masse d'une particule | kg |
| $m_{al}$ | Masse d'aluminium d'une particule | kg |
| $m_{ox}$ | Masse d'alumine d'une particule | kg |
| $\dot{m}_p$ | Débit massique évaporé | $\mathrm{kg.s^{-1}}$ |
| | | |
| $Y_p$ | Fraction massique des particules | s.d. |
| $\mathbf{u}_p$ | Vecteur vitesse | $\mathrm{m.s^{-1}}$ |

| | | |
|---|---|---|
| $T_p$ | Température | K |
| $h_p$ | Enthalpie massique | J.kg$^{-1}$ |
| $e_p$ | Energie interne massique | J.kg$^{-1}$ |
| $E_p$ | Energie totale massique | J.kg$^{-1}$ |
| | | |
| $Re_p$ | Nombre de Reynolds particulaire | s.d. |
| $C_D$ | Coefficient de traînée | s.d. |
| $Nu_c$ | Nombre de Nusselt convectif | s.d. |
| $Sh_c$ | Nombre de Sherwood convectif | s.d. |
| $Sh_c^*$ | Nombre de Sherwood convectif avec effet de film | s.d. |
| | | |
| $c_{p,p}$ | Capacité calorifique massique | J.kg$^{-1}$.K$^{-1}$ |
| $L_v$ | Chaleur latente de vaporisation | J.kg$^{-1}$ |
| $Q_r$ | Chaleur dégagée par la combustion | J.kg$^{-1}$ |
| | | |
| $\mathbf{F}_p$ | Force de traînée | N |
| $\mathrm{H}_p$ | Echange de chaleur | J.s$^{-1}$ |
| $\mathrm{K}_p$ | Taux de variation de taille | m$^2$.s$^{-1}$ |
| | | |
| $n^{(k)}$ | Concentration en nombre de la section $k$ | m$^{-3}$ |
| $m^{(k)}$ | Concentration massique de la section $k$ | kg.m$^{-3}$ |

**Autres :**

| | |
|---|---|
| $f$ | Fonction de distribution en nombre (NDF) |
| $\mathcal{B}$ | Opérateur de fragmentation |
| $\mathcal{C}$ | Opérateur de collision |
| $\mathcal{S}$ | Opérateur des termes sources de couplage |
| $\mathcal{T}_g$ | Opérateur de transport gaz |
| $\mathcal{T}_k$ | Opérateur de transport de la section $k$ |
| $L$ | Fonction lognormale |

## Lettres grecques

**Pour la phase gazeuse :**

| | | |
|---|---|---|
| $\alpha^*, \beta^*$ | Coefficients d'atténuation et de dispersion acoustique | s.d. |
| $\gamma$ | Coefficient isentropique | s.d. |
| | | |
| $\rho_g$ | Masse volumique | kg.m$^{-3}$ |
| $\mu_g$ | Viscosité dynamique | Pa.s |
| $\lambda_g$ | Conductivité thermique | W.m$^{-1}$.K$^{-1}$ |
| | | |
| $\tau_g$ | Temps caractéristique | s |
| $\tau_{acou}$ | Temps caractéristique acoustique | s |
| $\tau_g^c$ | Temps convectif | s |
| | | |
| $\omega$ | Pulsation acoustique | rad.s$^{-1}$ |

**Pour la phase dispersée :**

| | | |
|---|---|---|
| $\kappa^{(k)}$ | Fonction de reconstruction de la section $k$ en surface | m$^{-5}$ |
| $\rho_p$ | Masse volumique de la particule | kg.m$^{-3}$ |
| $\rho_l$ | Masse volumique du liquide | kg.m$^{-3}$ |
| $\alpha_p$ | Fraction volumique des particules | s.d. |
| $\mu_{tot}$ | Taux de chargement total | s.d. |
| | | |
| $\tau_{u,T}$ | Temps de relaxation dynamique ou thermique | s |
| $\tau_{conv}$ | Temps convectif | s |
| $\tau_m$ | Temps caractéristique d'évaporation | s |

## Abbréviations/Acronymes

**Anglais :**

| | |
|---|---|
| ASSM | Aerodynamics of Segmented Solid Motors program |
| CFD | Computational Fluid Dynamics |
| CFL | Courant Friedrichs Lewy |
| CPU | Central Processing Unit |
| CSVM | Coupled Size Velocity Moment method |
| DNS | Direct Numerical Simulation |
| DPS | Discrete Particle Simulation |
| DSMC | Direct Simulation Monte-Carlo |
| EMSM | Eulerian Multi Size Moment |
| ENO | Essentially Non Oscillatory scheme |
| GC | Gaussian Closure |
| GPBE | Generalized Population Balance Equation |
| HLL | Harten Lax Leer scheme |
| HPC | High Performance Computing |
| KBMM | Kinetic Based Moment Method |
| LES | Large Eddy Simulation |
| MDF | Mass Density Function |
| MF | Multi-Fluid method |
| MUSCL | Monotonic Upstream-Centered Scheme for Conservation Law |
| NDF | Number Density Function |
| NS | Navier-Stokes |
| ODE | Ordinary Differential Equation |
| OSM-MF | One Size Moment MF method |
| PGD | Pressureless Gas Dynamics |
| PTC | Particle Trajectory Crossing |
| RANS | Reynolds-Averaged Navier-Stokes |
| SKE | Sectional Kinetic Evaporation scheme |
| SP | Stochastic Parcel |
| SRM | Solid Rocket Motor |
| SRST | Simultaneous Reactive Source Term |
| TVD | Total Variation Diminishing |
| TSM-MF | Two Size Moment MF method |
| VS | Vortex Shedding (A : d'angle ; O : d'obstacle ; P : Pariétal) |
| WENO | Weighted Essentially Non Oscillatory scheme |
| WB | Williams-Boltzmann equation |

**Français :**

| | |
|---|---|
| CEDRE | Code d'Ecoulements Diphasiques Réactifs pour l'Energétique |
| CNES | Centre National d'Etudes Spatiales |
| DEFA | Département d'Energétique Fondamentale et Appliquée |
| DGA | Direction Générale de l'Armement |
| EDO | Equation Différentielle Ordinaire |
| GE | Modèle Gaz Equivalent |
| ITHAC | Instabilité THermo-Acoustique |
| ODP | Oscillations De Poussée |
| ONERA | Office National d'Etudes et de Recherches Aérospatiales |
| OX | Espèce gaz OXydant |
| MC | Méthode Multi-Classe |
| MPS | Moteur à Propergol Solide |
| PC | Espèce gaz Produits de Combustion |
| PTI | Protection Thermique Interne |
| PTF | Protection Thermique de Face |
| RK | Schéma Runge-Kutta |
| RKI | Schéma Runge-Kutta Implicite |
| SAP1 | Simulation d'Acoustique Polydisperse 1D |
| SPIREE | Simulation de Particules Inertes ou Réactives en Ecoulement d'un point de vue Eulérien |

# Introduction

Pour un grand nombre d'applications industrielles, l'étude des écoulements diphasiques constitués d'un brouillard de particules liquides ou solides qui interagissent avec une phase gazeuse instationnaire, est un enjeu capital. L'étude de l'influence des sprays apparaît comme une nécessité pour la conception de machines thermiques telles que les moteurs automobiles, les turboréacteurs, les statoréacteurs ou encore les moteurs à propergol liquide. En effet, la grande variété de tailles de gouttes de cette phase dispersée joue un rôle majeur dans les échanges avec le gaz et donc dans la dynamique de ces écoulements. La manière dont la distribution en taille évolue suite à des phénomènes d'évaporation, de coalescence ou encore de fragmentation est souvent déterminante pour évaluer correctement l'impact de la phase dispersée sur l'écoulement et donc son rôle sur le fonctionnement et les performances du système.

Dans le contexte de la propulsion solide, l'ajout de particules d'aluminium dans le propergol améliore de façon significative les performances du moteur grâce à une augmentation sensible de la température de chambre. La combustion de gouttes d'aluminium concentrées à proximité de la surface du propergol et la dispersion dans la chambre de résidus d'alumine de différentes tailles (allant de diamètres inférieurs au micron jusqu'à des diamètres d'une centaine de microns) et en quantité importante (une fraction massique pouvant atteindre 0.4 puisque l'alumine peut représenter jusqu'à 40% en masse des produits de combustion) a un impact notoire sur le fonctionnement du moteur, en particulier sur sa stabilité. En effet, il n'est pas rare qu'un moteur à propergol solide présente des instabilités de pression au sein de la chambre de combustion qui conduisent à des oscillations de la poussée du moteur. Les vibrations générées et leurs couplages avec la structure de l'engin sont potentiellement néfastes pour la charge utile et les équipements. Des études expérimentales et des simulations ont montré que ces oscillations pouvaient être provoquées par un couplage entre les instabilités intrinsèques de l'écoulement et l'acoustique de la chambre. Dans ce cas, il a été mis en évidence que la combustion des gouttes d'aluminium et la présence de résidus d'alumine dans l'ensemble du moteur pouvaient être des éléments atténuateurs ou amplificateurs des niveaux d'instabilités. Une attention plus marquée concerne la caractérisation et l'évaluation d'une instabilité particulière de type thermo-acoustique, spécifiquement liée à la combustion des particules d'aluminium et à son couplage avec l'acoustique de la chambre. L'étude de cette instabilité nécessite des calculs précis de l'étendue de la zone de combustion, du profil thermique, de la chaleur dégagée par la combustion des gouttes et de la distribution en taille des résidus d'alumine en fin de combustion. Cette analyse se situe dans un contexte d'études multi-physiques complexes couplant des phases compressibles et incompressibles, réactives et inertes au sein d'un écoulement présentant de fortes variations locales de densités, de températures et de vitesses ainsi qu'une forte diversité de nombre de Mach et de structure aérodynamique entre la chambre et la tuyère.

Afin d'optimiser la conception des futurs moteurs, il est attendu entre autres une meilleure compréhension des effets de la phase dispersée sur l'écoulement interne et donc des mécanismes d'échanges de masse, de quantité de mouvement et d'énergie entre les phases. Le coût conséquent d'une campagne d'essais et la difficulté à visualiser et à caractériser l'écoulement au sein des moteurs à propergol solide justifient l'essor des simulations numériques. Toutefois, il faut bien garder à l'esprit qu'une approche numérique demeure à la fois complémentaire et dépendante des observations expérimentales ; complémentaire, dans le sens où elle permet de sonder un écoulement difficilement accessible au diagnostic optique et à la mesure, et dépendante, via son besoin en données d'entrée réalistes et de validation des modèles. Notre présente contribution cherche à améliorer la modélisation des écoulements à phase dispersée et à restituer avec fidélité les couplages complexes entre les deux phases en particulier celui opérant par exemple entre la combustion des gouttes, la structure hydrodynamique de l'écoulement et l'acoustique de la chambre [Gallier and Godfroy, 2009; Radenac, 2013; Dupays, 2002b]. Cette contribution s'inscrit donc dans la continuité des efforts passés visant à relever le challenge de la simulation prédictive de la stabilité des MPS.

Au sein d'un moteur à propergol solide, la concentration massique des gouttes est suffisamment importante pour modifier notablement l'écoulement. On parle alors de couplage fort entre les phases (ou encore two-way coupling en anglais). Exceptées quelques zones du moteur, par exemple au fond arrière qui présente parfois une flaque d'alumine, le brouillard de gouttes a une fraction volumique qui n'excède pas $10^{-2}$ et forme donc une phase dispersée que l'on différencie d'une structure d'écoulement à phase séparée [Ishii, 1975]. En propulsion solide, la concentration massique relativement élevée justifie que l'on parle de phase dispersée modérément dense. Les effets rétroactifs de cette phase sur le gaz sont particulièrement difficiles à apprécier d'autant que le spray est polydisperse, i.e. constitué de gouttes de tailles très diverses. Les plus grosses gouttes font quelques centaines de microns et les plus petites sont nanométriques. La polydispersion (polydispersity en anglais) est donc grande et se traduit par des écarts d'autant plus remarquables sur ces temps de réponse des particules aux sollicitations dynamiques et thermiques du gaz que les temps caractéristiques varient comme le carré du diamètre. La dynamique propre à chaque taille et les propriétés thermodynamiques locales de la phase gazeuse par ailleurs multi-espèce jouent un rôle prépondérant par exemple dans la dynamique de la zone de combustion. La dispersion des résidus d'alumine dans certaines zones de l'écoulement et la conséquence de cette dispersion sur la structure de l'écoulement et sur la propagation des ondes acoustiques militent pour la nécessité de prendre en compte la polydispersion.
Une autre caractéristique des sprays polydisperses concerne la possibilité d'avoir localement des gouttes à des vitesses différentes ce qui entraîne éventuellement des croisements de trajectoires (PTC pour Particle Trajectory Crossing en anglais). On parle alors de polydispersion en vitesse (ou polykineticity en anglais). Deux situations sont envisageables : 1- des croisements entre des particules de tailles différentes, il s'agit d'hetero-PTC 2- des croisements entre des particules de même taille, on parle d'homo-PTC. Cette dernière situation a été étudiée et une modélisation a été proposée dans [Simoes et al., 2005; Simoes, 2006] pour des écoulements au sein de MPS. Notons que la polydispersion en vitesse est une cause possible de modification de la distribution en taille du spray suite à des collisions conduisant à la coalescence des gouttes [Doisneau et al., 2012; Doisneau, 2013]. Ce phénomène est plus marqué quand la concentration massique est importante.

La modélisation des interactions entre phases doit s'inscrire dans un contexte multi-échelle spatial et temporel. Le niveau de description spatiale et les temps caractéristiques des phénomènes à caractériser déterminent le choix des modèles. Notre démarche repose donc sur deux aspects : 1- une représentation adaptée pour chaque phase 2- une approche numérique dédiée au traitement des échanges entre le gaz et les particules. Ces travaux portent sur le développement et la résolution de modèles pour la phase dispersée et leur couplage avec le gaz dans un contexte instationnaire.
Afin d'assurer une représentativité fidèle de l'évolution en taille des gouttes en propulsion solide, l'approche choisie doit répondre aux critères suivants :

1. Tenir compte avec précision de la polydispersion du spray.

2. Faire un choix représentatif pour décrire la polydispersion en vitesse.

3. Assurer la compatibilité entre les modèles à l'échelle de la goutte et le choix de la modélisation pour le spray polydisperse. Ce point est capital car il témoigne de la flexibilité du modèle. Dans l'optique d'évaluer l'influence de différents modèles de combustion des gouttes d'aluminium, il est appréciable de ne pas revenir sur le choix de la modélisation à l'échelle du spray.

4. Proposer une modélisation présentant un coût calcul attractif pour des calculs industriels. Les trois critères précédents constituent un socle solide pour envisager des simulations prédictives de la stabilité des moteurs à propergol solide. Cependant, un autre aspect ne doit pas être écarté : l'implémentation des modèles et des méthodes au sein d'un code de calcul performant. Une attention est portée sur la construction du modèle dans le contexte du calcul haute performance (HPC pour High Performance Computing en anglais) ; on pense notamment à des calculs réalisés sur des architectures massivement parallèles.

Ces travaux s'inscrivent dans la politique de développement du code CEDRE [Refloch et al., 2011] développé à l'ONERA. Le code CEDRE est une plateforme multi-physique destinée à faire progresser la recherche mais aussi à traiter des applications industrielles dans le domaine de l'énergétique et de la propulsion. Le code est constitué d'un ensemble de solveurs, résolvant chacun une physique particulière. Pour décrire la phase dispersée en approche eulérienne, on fait appel au solveur

SPIREE [Murrone and Villedieu, 2011]. Pour la résolution de la phase gazeuse, le solveur eulérien CHARME est utilisé. Ces deux solveurs ont pour particularité d'être parfaitement adaptés aux maillages non-structurés. Il est également possible de coupler ces solveurs afin de proposer des simulations diphasiques dans le cas d'un couplage fort. L'implémentation de nouvelles méthodes au sein d'une plateforme multi-solveur ainsi que les exigences liées à la performance d'un code massivement parallèle constituent un défi du point de vue de la modélisation et de la stratégie numérique à adopter. Le code CEDRE présente l'avantage d'être un outil numérique de pointe et flexible pour à la fois éprouver de nouvelles méthodes et réaliser des calculs à vocation industrielle. Pour l'ensemble des développements proposés dans le code CEDRE, nous nous sommes fixés un cahier des charges qui constitue un fil conducteur pour les nouveaux modèles et schémas développés dans cette contribution. Nous avons pour exigences : - l'optimisation du ratio coût/précision - la compatibilité des méthodes avec une structure algorithmique massivement parallèle et une utilisation sur des maillages structurés généraux - la pérennisation du code via le développement de méthodes facilement implémentables et modifiables.

Afin de décrire des sprays polydisperses modérément denses, nous optons ici pour une approche cinétique en référence à la théorique cinétique des gaz. D'un point de vue statistique, le spray est décrit comme des particules ponctuelles et isolées auxquelles des propriétés globales sont rattachées telles que la vitesse au centre de gravité. Bien que la particule soit considérée ponctuelle, sa morphologie doit être définie pour calculer les interactions de celle-ci avec son environnement. Nous nous concentrons sur des particules sphériques qui ne dépendent que d'un seul paramètre pour la taille. Une fonction de distribution en nombre (ou NDF pour Number Density Function en anglais) est employée pour représenter le spray et son évolution liée aux échanges de masse, de quantité de mouvement et d'énergie avec le gaz et les interactions entre particules. L'équation de transport de Williams-Boltzmann est particulièrement pertinente pour suivre l'évolution de cette NDF dans le contexte des sprays polydisperses [Williams, 1958; Williams, 1985]. Pour sa résolution, deux approches sont possibles :

- Les méthodes lagrangiennes résolvent précisément la NDF via une discrétisation particulaire de l'équation. La répartition des termes sources de masse, de quantité de mouvement et d'énergie sur une grille eulérienne du gaz à l'endroit où se situent les particules a longtemps été une problématique en terme de diffusion numérique. Des travaux récents [Capecelatro and Desjardins, 2013; Zamansky et al., 2014] assurent la convergence du couplage entre phases lors du raffinement en maillage. Les techniques proposées sont actuellement limitées aux maillages structurés et la précision du traitement du couplage fort demeure problématique quand il s'agit d'utiliser des méthodes d'ordre élevé pour la résolution de la phase gazeuse. Cependant, ces nouvelles approches lagrangiennes tendent à être de plus en plus compétitives en terme de scalabilité sur des architectures parallèles [Capecelatro and Desjardins, 2013; Zamansky et al., 2014]. Précisons que dans les travaux de R. Zamansky ces améliorations ont été réalisées dans le contexte de calculs DPS (Discrete Particle Simulation). Le ratio entre précision et coût calcul reste toutefois à être évalué. En effet, ces méthodes peuvent être onéreuses pour décrire les interactions entre le spray polydisperse et une phase gazeuse instationnaire. Cela est particulièrement marqué quand le brouillard présente des phénomènes de collisions et de coalescence.

- Les méthodes eulériennes sont une alternative particulièrement intéressante dans la mesure où elles se prêtent naturellement aux calculs réalisés sur des architectures parallèles. De plus, l'étude des interactions diphasiques dans le contexte d'un couplage fort est facilitée car le même formalisme eulérien est employé pour décrire la phase gazeuse. On parle donc d'un modèle Euler-Euler. Les travaux présentés dans [Najjar et al., 2006; Attili et al., 2009] ont mis en évidence l'intérêt d'utiliser l'approche eulérienne pour suivre l'évolution des particules non-inertielles telles des fumées en complément des méthodes lagrangiennes pour la description des particules plus inertielles. En dépit de ces avantages, les modélisations eulériennes en règle générale souffrent de certains handicaps tels que l'effort de modélisation à mener pour restituer simultanément plusieurs mécanismes physiques. On note également les difficultés à décrire correctement la polydispersion en vitesse, et donc à élargir le spectre de Stokes [Balachandar and Eaton, 2010]. En raison de la nature hypercompressible de la phase dispersée eulérienne et des nombres de Stokes importants conduisant à des croisements de particules, le développement de modèles et de schémas dédiés au transport des particules est particulièrement délicat. La stabilité numérique et le contrôle de la diffusion numérique sont des contraintes fortes.

De nombreux travaux ont été réalisés ces dernières années pour améliorer l'approche eulérienne et

lever progressivement les limitations mentionnées plus haut. Les méthodes pour décrire précisément la polydispersion se sont principalement développées autour des méthodes de moments [Marchisio and Fox, 2005; Fox et al., 2008; Kah, 2010] et de l'approche Multi-Fluide [Laurent and Massot, 2001; Laurent et al., 2004b; de Chaisemartin, 2009] traitant de la variable taille. En conséquence, le traitement de la polydispersion en vitesse dans le cas hetero-PTC a été résolu. D'autres approches utilisant des méthodes de moments d'ordre élevé sur la variable vitesse ou encore des fermetures algébriques ont amélioré la résolution des croisements de type homo-PTC [Masi, 2010; Vié et al., 2015]. Un travail important a également été entrepris pour construire des schémas de transport précis à l'ordre deux et robuste dans le contexte des fluides hypercompressibles [de Chaisemartin, 2009; Le Touze et al., 2015; Boileau et al., 2015]. De plus, la modélisation de la coalescence est devenu accessible pour certaines méthodes de moments [Fox et al., 2008] ainsi que pour les modèles Multi-Fluide [Laurent et al., 2004a; Doisneau et al., 2013]. L'apport scientifique de ces contributions est la description complexe des interactions goutte-goutte via les échanges de masse, de mouvement et d'énergie entre différentes tailles de gouttes.

L'approche eulérienne utilisée dans cette contribution repose sur une méthode de moments sur la NDF que l'on conditionne par la variable taille assurant ainsi la dérivation d'un système appelé "semi-cinétique" par le biais duquel des corrélations taille/vitesse et taille/température sont prises en compte. Cette stratégie assure une réduction de la taille de l'espace des phases. A partir du système semi-cinétique, les méthodes Multi-Fluide (ayant pour acronyme MF) [Laurent and Massot, 2001; de Chaisemartin, 2009] sont dérivées en discrétisant l'espace des tailles par une méthode Volumes Finies et intégrant de manière continue la variable taille sur des intervalles fixes sur lesquels on suppose une fonction de forme. Des systèmes d'équations de conservation pour la masse, la quantité de mouvement et d'énergie sont ainsi obtenus sur ces intervalles appelés sections. Chaque système est vu comme un fluide différent qui est en couplage fort avec la phase gazeuse via des termes sources. Au niveau Multi-Fluide, la résolution des corrélations taille/vitesse et taille/température est assurée par des modèles de fermetures établis au sein de chaque section. A l'ONERA et dans certaines parties de cette thèse, l'approche MF est aussi nommée la méthode sectionnelle en référence à [Tambour, 1984; Greenberg et al., 1993; Massot et al., 1998; Murrone and Villedieu, 2011]. Précisons qu'avant [Laurent and Massot, 2001], les approches sectionnelles pour les sprays introduites par Tambour n'étaient pas dérivées à partir du niveau cinétique. Les développements de F. Laurent sur le modèle MF ont permis une reformulation des méthodes sectionnelles en établissant un lien rigoureux avec le modèle cinétique en précisant les hypothèses sous-jacentes. D'autres approches eulériennes sont envisageables comme la méthode Multi-Classe (MC) ou d'échantillonnage (sampling method en anglais) que nous utilisons également dans cette thèse. Elle adopte une discrétisation de la variable taille en employant une somme de fonctions de Dirac pour certaines valeurs de l'espace des tailles. Comme pour l'approche Multi-Fluide, des systèmes d'équations de conservation sont obtenus pour chaque taille et les interactions gaz-gouttes sont décrites par l'expression de termes sources. La méthode eulérienne Multi-Classe a démontré son efficacité dans de nombreuses simulations diphasiques réactives [Laurent and Massot, 2001; Lupoglazoff et al., 2002; Gallier and Godfroy, 2009], mettant en avant des modèles d'évaporation et de combustion complexes. Une bibliographie plus détaillée de la méthode MC, son positionnement au sein des approches eulériennes ainsi que ses similitudes avec les méthodes de pivot sont donnés dans [Doisneau, 2013]. Une des limitations de l'approche MC est le choix de la représentation discrète en taille de la NDF ce qui rend très difficile la modélisation des interactions entre différentes tailles de particules alors que les méthodes MF traitent naturellement, par exemple les phénomènes de fragmentation [Dufour, 2005] et de coalescence [Laurent et al., 2004a]. En effet, le formalisme Multi-Fluide présente des termes appropriés de flux d'échanges entre sections assurant le suivi de nouvelles tailles de particules. De plus, l'approche continue des méthodes MF permet une flexibilité dans la description de la distribution en taille de la NDF. La méthode Multi-Classe est davantage appropriée pour résoudre l'évolution des distributions en taille présentant des modes particulièrement marqués mais moins efficace pour décrire les distributions en taille continues. Les méthodes MF sont aptes à suivre des évolutions complexes et non locales de la variable taille ce qui est le cas pour des situations de coalescence et de fragmentation. De plus, l'évaporation induit une évolution continue de la NDF naturellement traitée par la méthode MF.
Pour les méthodes MF, la précision du suivi de l'évolution en taille des particules résulte principalement du choix de la fonction de distribution en taille sur chaque section. Une hiérarchie de méthodes MF a été développée ; elle repose sur la résolution d'un certain nombre de moments en taille de la distribution : la méthode à un moment en taille (ou OSM pour One Size Moment method en anglais) dont la dérivation est proposée dans [Laurent and Massot, 2001; Laurent et al., 2004b], la méthode MF à deux moments (ou TSM pour Two Size moment method en anglais)

introduite dans [Dufour, 2005; Laurent, 2006] et la méthode MF à quatre moments (ou EMSM en anglais pour Eulerian Multi Size Moment) développée dans [Massot et al., 2010a; Kah et al., 2012]. En nombre de sections, ces approches mènent respectivement à une convergence à l'ordre un, deux et quatre [Vié et al., 2013] pour la description de la NDF. Utiliser plusieurs moments en taille n'est pas sans contraintes car des conditions de réalisabilité doivent être respectées ; mathématiquement le vecteur des moments doit rester dans l'espace des moments à chaque instant. Cette règle conduit systématiquement au développement de méthodes numériques et d'algorithmes "réalisables" sans que cela ne dégrade significativement l'efficacité computationnelle.
Afin d'obtenir un coût calcul raisonnable, l'approche MF à deux moments en taille est une alternative intéressante car elle assure une certaine précision pour le suivi de la distribution en taille, nécessaire à la restitution d'une dynamique complexe et un gain en temps calcul en utilisant un nombre limité de sections, soit un nombre réduit de systèmes d'équations de conservation à résoudre. La méthode TSM-MF ainsi que des méthodes numériques dédiées à l'intégration des termes sources de coalescence ont été développées, évaluées et utilisées dans [Laurent, 2002; Dufour, 2005; Laurent, 2006; Doisneau et al., 2013]. Notre contribution vient enrichir la modélisation de la phase dispersée aux cas de gouttes en évaporation et en combustion, jusqu'à présent limitée aux gouttes inertes pour la méthode MF dans CEDRE. Dans les cas d'un spray évaporant, les études antérieures autour de la méthode MF étaient limitées à des modèles de transferts de masse simplifiés pour lesquels le taux d'évolution de la taille est identique quelle que soit la taille des gouttes.

Une fois la modélisation du spray fixée, le choix d'une stratégie d'intégration en temps du système diphasique est crucial. Les interactions entre les structures de l'écoulement gazeux, l'acoustique de la chambre, la dynamique de la phase dispersée et les collisions entre particules soulignent la nature multi-échelle des simulations en propulsion solide. Une première approche consiste en une stratégie phase par phase qui intègre les systèmes gazeux et liquide séparément ; les termes sources sont modifiés et calculés à chaque étape de l'intégration en considérant une des deux phases figée. Il a été démontré que cette technique n'est pas robuste pour résoudre des problèmes raides caractérisés par un large panel d'échelles de temps numériques [Doisneau et al., 2014]. Les problèmes de stabilité de cette approche sont particulièrement marqués quand la fraction massique de la phase dispersée est élevée. D'autres stratégies sont envisageables comme les méthodes IMEX [Crouzeix, 1980; Shampine et al., 2006] qui associent des schémas explicites et implicites pour assurer des solutions aux problèmes raides. Cependant, le développement de ces méthodes est fortement dépendant de la nature mathématique des équations à résoudre. Ainsi, dès que la physique du problème à modéliser est modifiée, il est nécessaire de revoir l'ensemble de la méthode et son implémentation pour répondre aux contraintes de stabilité. La flexibilité de l'implémentation est une condition clé pour la pérennisation et l'amélioration constante d'un code CFD à vocation industrielle. Une alternative appropriée afin d'optimiser le ratio coût/précision est le choix d'une intégration en temps basée sur une séparation d'opérateurs (operator splitting en anglais). Elle consiste à séparer en sous-problèmes indépendants des phénomènes physiques distincts et de les traiter au sein d'opérateurs différents qui sont intégrés successivement. Cette technique de splitting présente de nombreux avantages ; le principal est la possibilité de résoudre chaque opérateur avec des méthodes numériques dédiées pour lesquelles un pas de temps interne est déterminé en fonction des échelles de temps caractéristiques du sous-système. Ainsi, le pas de temps global de la méthode (aussi appelé pas de temps de splitting) n'est pas contraint par des problèmes de stabilité numériques [Duarte et al., 2011]. La stratégie de splitting présente deux sources d'erreurs numériques que l'on souhaite maitriser au mieux : la première est l'erreur de splitting qui est introduite par la résolution indépendante de sous-systèmes qui sont temporellement couplés. Ce type d'erreur a été étudié dans le cas des systèmes de convection-diffusion [Hundsdorfer and Verwer, 2003; Duarte, 2011]. La seconde catégorie d'erreur résulte des problèmes de discrétisations temporelle et spatiale et des méthodes numériques associées à la résolution des sous-systèmes.
Dans le contexte des simulations diphasiques, le développement de cette technique nécessite donc d'identifier et d'analyser les problèmes numériques spécifiques aux échanges entre phases. De plus, le large panel de temps caractéristiques caractérisant les sprays polydisperses est une particularité à considérer en priorité dans la construction de la stratégie numérique. En trame de fond, on retrouve une recherche constante en matière de flexibilité et d'efficacité numérique répondant aux attentes industrielles.
Une réalisation commune [Doisneau et al., 2014] a été menée afin d'améliorer la stratégie d'intégration en temps du système diphasique pour des gouttes inertes dans le cas d'un couplage fort. La technique de splitting a également été étudiée pour des cas de coalescence [Doisneau et al., 2013; Doisneau, 2013]. Dans ce travail, nous proposons d'évaluer et de valider la méthode de séparation d'opérateurs pour le couplage entre une phase gazeuse et un spray polydisperse évaporant présen-

tant des temps caractéristiques très différents et en constante évolution.

Dans l'optique de réaliser des calculs prédictifs de l'impact de la combustion des gouttes d'aluminium sur les instabilités de fonctionnement, les objectifs scientifiques et les principaux développements menés au cours de cette thèse sont les suivants :

1. Travail sur les modèles de combustion spécifiques aux gouttes d'aluminium/alumine. On recherche un compromis entre d'une part la richesse du modèle afin d'obtenir une représentativité fidèle de la dynamique de combustion et des échanges entre phases et d'autre part la compatibilité avec l'approche de type cinétique pour les sprays.

2. Choix de la méthode Multi-Fluide à deux moments en taille pour la phase dispersée et amélioration du ratio coût/précision via l'emploi d'une reconstruction affine optimale d'ordre deux en temps et en espace apte à traiter l'évaporation et la coalescence des gouttes.

3. Développement d'un modèle Multi-Fluide innovant pour les gouttes à deux composants non miscibles pour la simulation de la combustion des gouttes d'aluminium contenant une calotte d'alumine.

4. Développement d'un schéma numérique robuste d'intégration des termes sources réactifs diphasiques écrits dans le contexte du modèle Multi-Fluide à deux moments en taille.

5. Etudes numériques et restitution des interactions instationnaires diphasiques acoustique/spray polydisperse en évaporation et en combustion par une méthode d'intégration temporelle de splitting. Une analyse est aussi proposée afin de rendre compte de l'efficacité de la stratégie de splitting pour un problème de couplage instationnaire diphasique présentant de la raideur numérique.

6. Implémentation et analyse des différents développements dans un code de recherche maison puis dans le code CEDRE de l'ONERA.

7. Réalisation de calculs de propulsion solide et analyse de la polydispersion sur la dynamique de combustion des gouttes et ses conséquences sur la stabilité des moteurs dans le cadre de configurations réalistes.

Dans l'ensemble de ces travaux, la résolution de l'écoulement diphasique est réalisée sans modèles de sous-maille pour la turbulence. On suppose que l'écoulement est pleinement résolu ; c'est donc le maillage choisi qui fixe les échelles spatiales correctement restituées. Le choix de la discrétisation spatiale est judicieusement déterminé et assure une résolution adaptée pour décrire les couplages combustion/hydrodynamique/acoustique dans les configurations de moteurs à propergol solide étudiées.
Les développements numériques proposés sont soumis à : 1- des vérifications quant il s'agit de méthodes dont les résultats peuvent être comparés à des solutions analytiques 2- des validations quant il s'agit de modèles dont la représentativité peut être confirmée expérimentalement. Une démarche progressive est proposée au travers de cas tests simplifiés puis via une approche globale sur des configurations à échelle réduite et à échelle 1.

Dans le cadre de cette thèse, une contribution importante est fournie afin de mener à bien le couplage entre les solveurs CHARME et SPIREE pour traiter des interactions diphasiques. La mise en place de la stratégie de splitting pour l'intégration en temps, les améliorations portant sur la méthode MF et les contributions scientifiques [Doisneau et al., 2014; Laurent et al., 2015] qui en découlent sont le résultat d'une collaboration fructueuse avec F. Doisneau.
Dans CEDRE, l'intérêt de l'approche Euler-Euler pour la résolution des écoulements diphasiques ne concerne pas uniquement les applications propulsion solide. Les travaux de C. Le Touze sur l'atomisation primaire d'une phase séparée pour les études d'injection en propulsion liquide soulignent les capacités du code CEDRE. Ses réalisations sur les schémas de transport pour les fluides compressibles [Le Touze et al., 2015] ainsi que nos échanges sur les modèles d'évaporation ont fortement contribué à améliorer la qualité des simulations en propulsion solide et en propulsion liquide.

Ce manuscrit est organisé autour de quatre parties qui présentent le contexte et les problématiques des simulations diphasiques pour la propulsion solide, la modélisation eulérienne des sprays réactifs polydisperses et bicomposants, les stratégies numériques pour les calculs instationnaires et finale-

ment les simulations diphasiques de propulsion réalisées avec le code CEDRE.

Du contexte général à la présentation des stratégies de modélisation et de résolution des écoulements diphasiques, la partie I souligne le choix des méthodes et des modèles adaptés pour l'étude des instabilités de fonctionnement en propulsion solide et l'impact de la combustion distribuée. Le chapitre 1 décrit la phénoménologie de l'écoulement interne en propulsion solide et plus particulièrement les différents mécanismes d'instabilité rencontrés.
Le chapitre 2 introduit le cadre spécifique de la combustion des gouttes d'aluminium via des résultats issus d'études expérimentales, théoriques et numériques du rôle de la combustion des gouttes ainsi que des résidus inertes sur la stabilité du moteur. On souligne que l'étude de la combustion des gouttes d'aluminium et de son impact potentiel sur la stabilité d'un moteur constitue un axe majeur d'effort dans la perspective du développement du futur lanceur Ariane 6. Les facteurs influents de la combustion nécessitant un effort de modélisation significatif sont soulignés ; les conséquences de la polydispersion en taille des gouttes sont mises en avant. Aussi, un état de l'art des modèles de combustion à l'échelle d'une goutte isolée d'aluminium est proposé. Un nouveau modèle de combustion respectant la nature bicomposant des gouttes est aussi introduit. Associé à une approche biespèce de la phase gazeuse, il présente l'avantage de restituer à moindre coût le mécanisme physique de consommation des espèces de la réaction en phase gazeuse. Cette approche est capitale pour suivre fidèlement la dynamique de la combustion et l'évolution des gouttes dans l'écoulement.
Le chapitre 3 aborde le second axe de recherches de cette thèse à savoir la stratégie de modélisation d'une phase dispersée dans le contexte où elle est couplée à une phase gazeuse instationnaire. Après avoir mis en évidence les grandeurs et échelles caractéristiques de notre problème, une discussion est entreprise pour déterminer la pertinence d'une approche pour le spray de type cinétique parmi l'ensemble des modèles diphasiques. Ce choix apparaît comme un compromis intéressant entre le niveau de description accordé pour les phénomènes étudiés et la contrainte de coût inhérente aux calculs industriels.

La partie II est consacrée aux travaux d'amélioration de la résolution de la phase dispersée via une approche eulérienne Multi-Fluide. Ces développements concernent aussi bien des gouttes monocomposants que des gouttes bicomposants. Le chapitre 4 justifie le choix de résolution de l'équation cinétique par une approche eulérienne et présente l'état de l'art des stratégies assurant une modélisation précise de la distribution en taille et des phénomènes physiques tels que le croisement de trajectoires. Dans ce contexte, le besoin de description de la polydispersion en taille et en vitesse est important. Parmi la hiérarchie des méthodes Multi-Fluide, nous mettons en évidence l'intérêt d'utiliser des méthodes MF à deux moments en taille pour décrire l'évolution de la distribution en taille pour des cas d'évaporation et de coalescence avec un ratio coût/précision intéressant.
Dans la première partie du chapitre 5, nous proposons une fonction de reconstruction optimale de la NDF au sein des sections pour les méthodes TSM-MF. Jusqu'à présent, des fonctions exponentielles ont été employées au sein des sections comme fonctions de forme afin de garantir certaines propriétés telles que la positivité de la fonction de distribution reconstruite. Néanmoins, l'étape d'inversion qui consiste à obtenir les paramètres de la fonction exponentielle à partir des moments en taille est coûteuse et pénalise la méthode TSM-MF en termes de rapidité. Nous améliorons l'approche TSM-MF en développant une famille de fonctions de forme basée sur une approche polynomiale : continue sur la section et affine sur un intervalle à déterminer. Cette reconstruction est une réelle avancée par rapport à l'approche exponentielle car elle répond parfaitement à notre objectif de contrainte de coût des calculs industriels. Dans la seconde partie du chapitre 5, nous soulignons l'importance de la polydispersion en taille des gouttes sur les interactions spray-acoustique. Dans ce contexte, nous illustrons l'intérêt d'utiliser des méthodes à plusieurs moments en taille afin d'obtenir une réponse acoustique précise pour un nombre de sections modéré. Les méthodes TSM-MF apparaissent alors comme un choix pertinent. Nous réalisons également des études paramétriques des stratégies de discrétisation de l'espace des tailles afin de guider les mises en données de simulations de configurations moteur.
Dans le chapitre 6, nous nous intéressons à l'amélioration de la modélisation de la combustion des gouttes d'$Al/Al_2O_3$. Nous proposons des méthodes eulériennes innovantes afin de décrire avec fidélité la dynamique des transferts de masse entre la goutte et son environnement. Nous cherchons en particulier à suivre à la fois la diminution de la masse d'aluminium par évaporation et l'augmentation de la masse d'oxyde dans le cas d'une éventuelle rétrodiffusion d'alumine vers la goutte. Nous nous fixons également comme exigence la possibilité de traiter la coalescence des gouttes. A partir d'une approche cinétique basée sur le suivi des composants constituant les gouttes, nous dérivons une méthode MF construite autour d'une discrétisation d'un espace des masses à deux

dimensions. En reprenant le principe des méthodes à deux moments en taille, nous employons pour ces méthodes MF bicomposants un moment d'ordre 0 pour le nombre et deux moments d'ordre 1 pour les masses d'aluminium et d'alumine. Nous développons aussi une méthode MF bicomposant simplifiée basée sur un conditionnement de la masse d'aluminium par la masse d'alumine. L'évolution de la bicomposition de la goutte est alors réduite à l'étude de l'espace de la masse d'alumine conduisant à un gain en temps de calcul. L'amélioration de la description de la combustion des gouttes est significative et l'augmentation du coût calcul par rapport à une méthode basée sur le suivi de la taille semble limitée.

Dans la partie III, nous présentons les stratégies et les schémas numériques développés pour améliorer les calculs diphasiques réactifs instationnaires. Cette partie se compose de trois chapitres organisés de la manière suivante : - le chapitre 7 est consacré au choix et au développement des méthodes d'intégration en temps et en espace des systèmes diphasiques - le chapitre 8 présente le développement et la validation de schémas performants dédiés aux transferts de masse entre le spray et le gaz dans le contexte des méthodes MF - La validation des modèles et des méthodes numériques décrits dans les chapitres 7 et 8 est réalisée dans le chapitre 9.
Le chapitre 7 se compose de deux parties : le première porte sur l'établissement d'une stratégie de splitting dédiée au couplage des systèmes diphasiques. D'une part, nous proposons d'établir la hiérarchie des échelles de temps rencontrées en propulsion solide et de mettre en évidence l'intérêt de la technique de séparation d'opérateurs pour un code de calcul industriel. D'autre part, nous présentons une décomposition pertinente du système couplé en sous-systèmes dédiés respectivement aux phases de transport pour le gaz et les gouttes et à l'étape de couplage entre les phases. Des méthodes d'ordre 1 de Lie et d'ordre 2 de Strang sont proposées. Au sein de chaque opérateur, des schémas numériques dédiés peuvent être utilisés. La deuxième partie du chapitre 7 est alors consacrée au choix des méthodes numériques de résolution spatiale. Nous établissons un cahier des charges des schémas dans le contexte des calculs massivement parallèles et pour une utilisation sur des maillages non structurés généraux. Nous nous intéressons en particulier aux méthodes pour les sprays, modélisés dans ce travail comme un fluide hypercompressible. Ces schémas doivent répondre aux traitements des singularités et du vide ainsi qu'aux problèmes de diffusion numérique inhérente à une résolution eulérienne.
Le chapitre 8 est dédié à l'intégration des termes sources entre le gaz et les gouttes. Dans le contexte des méthodes MF, nous développons des schémas numériques pour prendre en compte avec précision les échanges entre les phases ainsi que les flux échangés entre les sections. Une attention particulière a été portée sur les conditions de réalisabilité sur les moments en taille au sein de chaque section. Un schéma similaire est également proposé pour le traitement des termes sources de la méthode MF bicomposant développée dans le chapitre 6. Finalement, dans un contexte 0D, nous vérifions et nous évaluons la qualité de la solution numérique de l'ensemble de ces méthodes en utilisant des lois d'évaporation pour lesquelles des solutions analytiques de l'évolution de la NDF existent. Nous les testons également pour différentes discrétisations de l'espace des tailles.
Dans le chapitre 9, nous proposons une hiérarchie de cas tests 1D d'acoustique diphasique pour valider la stratégie de couplage entre le gaz et les gouttes. Le niveau de précision requis pour restituer avec fidélité les interactions spray-acoustique offre un cadre d'études numériques adéquat pour évaluer la pertinence de la technique de splitting. Nous évaluons la stratégie de séparation d'opérateurs pour des gouttes inertes et pour des gouttes en évaporation. Dans ce dernier cas, nous validons également le schéma d'intégration des termes sources réactifs développé dans le chapitre 6 dans un contexte 1D. Finalement, nous proposons une analyse mathématique originale de l'erreur de splitting rencontrée pour des problèmes raides où les temps de relaxation des particules sont très rapides et plus petits que le pas de temps d'intégration. Nous caractérisons le comportement des méthodes de splitting de Lie et de Strang pour des cas d'acoustique linéaire et nous proposons une explication aux erreurs éventuellement observées dans les cas tests 1D.

La partie IV est dédiée aux simulations diphasiques réactives réalisées avec le code CEDRE. Nous mettons en lumière l'ensemble des développements proposés dans les chapitres précédents au travers de simulations applicatives de propulsion solide. Dans cette partie finale, nous évaluons l'impact de la polydispersion en taille sur la dynamique de la zone de combustion distribuée, et les conséquences sur le couplage aéroacoustique au sein d'un MPS.
Dans le chapitre 10, nous présentons la plateforme multi-physique CEDRE en soulignant les points forts du code tels que le traitement des maillages structurés généraux et une structure algorithmique performante pour réaliser des calculs massivement parallèles. Nous détaillons la logique d'implémentation de nos développements et nous expliquons dans quelle mesure ces derniers répondent au cahier des charges que nous nous sommes fixés dans l'ensemble de ce travail à savoir

optimiser le ratio coût/précision des méthodes et garantir la pérennisation du code.
Le chapitre 11 constitue une étude approfondie des modèles de combustion des gouttes d'aluminium et de l'influence de la distribution en taille au travers de simulations 1D de la zone de combustion. Nous comparons la dynamique de combustion des gouttes obtenue avec le modèle de diffusion des espèces à celle des autres modèles de combustion basés sur un temps de combustion supposé. Ce chapitre offre également une nouvelle validation de la stratégie de splitting et du schéma d'intégration des termes sources réactifs en complément de celle proposée dans le chapitre 9. Ces calculs valident l'implémentation de ces méthodes au sein du code CEDRE. L'analyse des résultats nous guident pour les mises en données des simulations moteur proposées dans les chapitres suivants.
Dans le chapitre 12, nous proposons une validation finale des méthodes dans un contexte multi-dimensionnel au travers de trois configurations MPS. La première étude est une configuration de moteur simplifiée 2D axisymétrique dédiée à l'étude des solveurs diphasiques. Dans ce cas test, nous étudions l'évaporation d'un brouillard de gouttes d'eau évoluant dans un champ gazeux instationnaire. Cette configuration nous permet d'une part d'évaluer la stratégie de splitting pour différents pas de temps, et d'autre part de comparer les méthodes eulériennes MC et TSM-MF affine et exponentielle. Nous illustrons à cette occasion le gain en temps de calcul obtenu en choisissant une reconstruction affine plutôt qu'exponentielle au sein des sections. Pour les deux autres configurations MPS, nous évaluons la pertinence de l'approche MF pour la simulation des gouttes d'aluminium en combustion et le suivi des résidus d'alumine. Nous proposons également une première analyse de l'importance de la polydispersion en taille sur les niveaux d'instabilité moteur. Dans ce cas précis, les gouttes d'aluminium brûlent complètement ce qui permet de décorréler l'impact de la combustion des gouttes de celle des résidus inertes sur les instabilités aéroacoustiques.
Dans le chapitre 13, nous réalisons un ensemble de simulations diphasiques sur la configuration P230 afin de déterminer quelles tailles de gouttes et de résidus jouent un rôle prépondérant sur le couplage aéroacoustique en conditions réelles de tir. Cette étude approfondie est structurée de la manière suivante : 1- une analyse de la zone de combustion 2- une analyse plus globale de la structure de l'écoulement interne et 3- une étude de sensibilité des niveaux d'ODP en fonction de la granulométrie des gouttes isolées et des agglomérats supposée de la configuration P230. Finalement, ces calculs de démonstration soulignent les avancées notables réalisées pour améliorer la compréhension des mécanismes de couplage gaz-gouttes et l'impact d'une phase dispersée réactive sur les instabilités moteur.

Plusieurs articles soumis dans des revues internationales à comité de lecture résultent de ce travail de thèse :

- Sibra, A., Dupays, J., Murrone, A., Laurent, F., et Massot, M. *Simulation of reactive sprays coupled to unsteady flows in solid rocket motors : Efficient strategy using eulerian multi-fluid methods.* Soumis dans Journal of Computational Physics, 2014. Disponible sur https ://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01063816.

- Doisneau, F., Sibra, A., Dupays, J., Murrone, A., Laurent, F., et Massot, M., *Numerical strategy for unsteady two-way coupled polydisperse sprays : application to solid-rocket instabilities.* Publié dans Journal of Propulsion and Power, 30(3) :727–748, 2014.

- Laurent, F., Sibra, A., et Doisneau, F. (2015). *Two-size moment eulerian multi-fluid model : a flexible and realizable high-fidelity description of polydisperse moderately dense evaporating sprays.* Soumis dans Communication in Computational Physics, pages 1–42. Disponible sur https ://hal-centralesupelec.archives-ouvertes.fr/hal-01169730/document. Cette contribution est fournie en Annexe D

Au cours de cette thèse, plusieurs présentations dans des conférences internationales ont été réalisées :

- Sibra, A., Dupays, J., Massot, M. et Laurent, F., *A new Eulerian Multi-Fluid model for bi-component polydisperse sprays : an essential approach to evaluate the impact of aluminum combustion on Solid Rocket Motor instabilities*, AIAA paper 2013-4083, 49th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit, 14-17 July 2013, San Jose, CA, USA.

- Sibra, A., Dupays, J., Murrone, A., Laurent, F., and Massot, M., *Efficient numerical coupling strategy for evaporating polydisperse sprays in unsteady multi-species flows : Application to solid rocket motor simulations*, 5th European Conference for Aeronautics and Space Sciences, EU-

CASS, 1-5 July 2013, Munich, Allemagne.

– Sibra, A., Massot, M., Laurent, F. et Dupays, J.. *Splitting method for hyperbolic systems with stiff relaxation source terms : analysis and application to polydisperse sprays in solid rocket motors*, 4th Workshop on Numerical Analysis of Partial Differential Equations, WONAPDE, 11-15 January 2013, Concepcion, Chili.

– Sibra, A., Laurent, F., Murrone, A., Dupays, J. et Massot, M., *Numerical coupling strategy for evaporating two-phase flow computations : application to Solid Rocket Motors*, European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering, ECCOMAS, 10-14 September 2012, Vienne, Autriche.

Cette thèse a été financée par l'ONERA et a été dirigé par Marc Massot, Frédérique Laurent et Joël Dupays. Ces travaux ont été réalisés en collaboration avec l'équipe de Mathématiques Appliquées du laboratoire EM2C de l'Ecole Centrale Paris. Cette contribution est également le fruit d'une forte collaboration avec François Doisneau, Angelo Murrone, Clément Le Touze, Emmanuel Montreuil et Nicolas Lupoglazoff.

Première partie

# Objectifs et problématiques des simulations diphasiques appliquées aux moteurs à propergol solide

# Chapitre 1

# Contexte général de la propulsion solide et étude des instabilités de fonctionnement

*Dans ce chapitre, nous présentons le contexte applicatif centré sur la propulsion solide. Dans un premier temps, nous décrivons la phénoménologie de l'écoulement interne et les spécificités de la combustion des propergols aluminisés. Nous listons également les problèmes et les axes de recherches pour le développement des futurs moteurs à propergol solide que cela soit en termes de fiabilité ou encore de performances. Dans un second temps, nous expliquons en détails le mécanisme des instabilités de fonctionnement, sujet de préoccupation majeure notamment dans les applications civils. En effet, ces instabilités qui prennent naissance dans la chambre et qui conduisent à des oscillations de poussée du moteur constituent des sources de vibrations gênantes, voire néfastes, pour le lanceur et ses équipements ou la charge utile. Nous soulignons ainsi l'intérêt du développement d'outils numériques prédictifs, en complément de campagnes expérimentales. Finalement, nous détaillons les phénomènes d'interactions, identifiés à ce jour, menant à une amplification ou à une atténuation des niveaux d'instabilités.*

## 1.1 La propulsion solide et ses domaines d'applications

### 1.1.1 Principe de la propulsion fusée et les différentes catégories de moteurs

#### 1.1.1.1 Principe de base de la propulsion fusée

Un moteur-fusée est un système propulsif reposant sur l'éjection d'une partie de sa masse à très grande vitesse. Conséquence du principe d'action-réaction d'Isaac Newton, une poussée de direction opposée à celle de la projection de matière est générée et met en mouvement l'engin. A la différence des systèmes aérobies qui utilisent l'air ambiant comme comburant, les propulseurs dits anaérobies sont autonomes car ils emportent la totalité de la masse à éjecter. Ils peuvent donc assurer des déplacements dans le vide et donc des voyages spatiaux. A partir de 1903, ce sont les travaux de Constantin E. Tsiolkovski, relatés dans son ouvrage "L'exploration de l'espace cosmique par des engins à réaction", qui posent les principes de bases des moteurs-fusées. Par la suite, c'est le développement des missiles V2 (Fig.(1.1)) au cours de la seconde guerre mondiale qui marque l'avènement des premiers lanceurs spatiaux. Wernher Von Braun, leur concepteur, deviendra d'ailleurs un des principaux responsables de la NASA et développeur de la fusée Saturn V, principal lanceur des missions Apollo.

#### 1.1.1.2 Descriptif des moteurs-fusées

De nos jours, il existe un nombre important de moteurs-fusées qu'il est possible de regrouper en deux catégories :

**La propulsion non chimique**
La propulsion non chimique regroupe essentiellement les moteurs nucléaires et électriques. Les premiers reposent sur l'éjection d'un fluide porté à très haute température par une source de

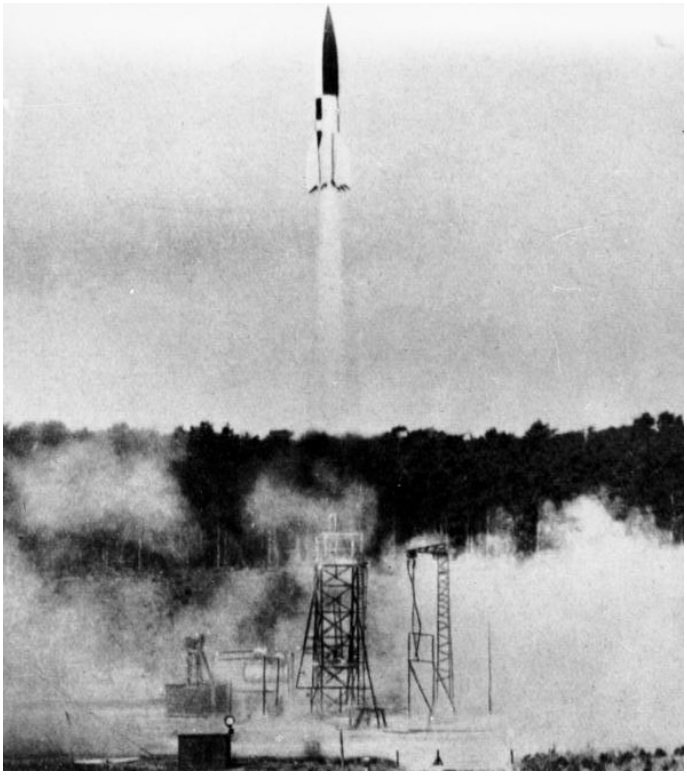

**FIGURE 1.1** – *Essai d'une fusée V2 à l'été 1943, quatre secondes après le décollage*

chaleur obtenue par fission nucléaire. La faible tenue en température des matériaux actuels ainsi que les problèmes environnementaux et de sécurité liés à l'emploi du nucléaire spatial limitent fortement l'emploi de cette technologie. Les moteurs électriques utilisent des forces électrostatiques ou électromagnétiques pour accélérer un fluide constitué essentiellement d'ions. Cependant la faible densité de la masse propulsive implique des vitesses d'éjection très importantes pour produire des poussées correctes. Cela nécessite l'utilisation de systèmes de production d'énergie difficiles à miniaturiser et finalement trop imposants. De fait, les moteurs électriques sont essentiellement installés sur les satellites en tant que correcteurs de trajectoires. D'autres systèmes propulsifs entrent également dans la catégorie de la propulsion non chimique telle la propulsion solaire.

**La propulsion chimique**

La propulsion chimique regroupe principalement les moteurs à ergols liquides et à propergol solide. Ces deux types de moteurs emportent la totalité du comburant et du carburant nécessaires à la réaction chimique assurant la production d'un fort volume de gaz à haute température dans une enceinte confinée appelée chambre de combustion. Ces gaz sont ensuite accélérés dans une tuyère De Laval, aussi appelée convergent-divergent, qui assure la conversion de la chaleur et de la pression en énergie cinétique comme présenté dans la Fig.(1.2).

Les propulseurs dits liquides (ou LRE pour Liquid Rocket Engine en anglais) génèrent des gaz de combustion à partir de la réaction d'un oxydant et d'un réducteur embarqués à l'état liquide dans des réservoirs séparés. L'injection des ergols liquides dans une chambre de combustion donne lieu à une réaction exothermique produisant des gaz très chauds qui vont se détendre dans la tuyère et assurer la poussée. Les moteurs liquides sont intéressants car ils ont une impulsion spécifique élevée (cf. Eq.1.3). Ils présentent néanmoins deux inconvénients : ce sont des moteurs d'assez petite taille ce qui implique d'en utiliser un certain nombre pour assurer le décollage et les ergols sont peu denses ce qui conduit à un indice constructif peu favorable lorsqu'il est recherché des fortes poussées à faible coût. La seconde contrainte est le système complexe d'alimentation en ergols composé des injecteurs, des turbopompes, d'une turbine et d'un générateur de gaz, autant d'éléments sensibles pouvant connaître des aléas ou des pannes de nature très diverse. Finalement, le stockage des ergols liquides est particulièrement contraignant car il implique l'utilisation de réservoirs pressurisés et refroidis qui sont remplis quelques heures avant un décollage. Ces inconvénients n'ont cependant pas empêché le développement de lanceurs "tout liquide". Citons parmi ces derniers : les lanceurs Delta IV dans sa version légère et les lanceurs Soyouz, Ariane 3 et Saturn V.

Les moteurs à propergol solide (ayant pour acronyme MPS et en anglais SRM pour Solid Rocket

Motor) présentent quant à eux une conception beaucoup plus simple. En effet, l'oxydant et le réducteur sont réunis dans un matériau énergétique dense appelé propergol. Une chaîne pyrotechnique assure l'apport de chaleur nécessaire à l'allumage du propergol. Par la suite, la chaleur dégagée par les réactions de surface et la flamme entretient la combustion. Illustré en Fig.(1.2), il s'agit d'une combustion de surface au cours de laquelle le propergol régresse et assure la production d'un fort volume de gaz à hautes températures. Les poussées obtenues couvrent une gamme allant de quelques kN à plusieurs milliers de kN. Le principe même de l'emploi d'un matériau énergétique solide permet un gain en volume et offre une diminution en masse de la structure par rapport à un moteur à ergols liquides. De plus, l'absence de pièces sensibles et mobiles limitent les aléas. En revanche, il n'est pas possible de stopper la combustion une fois cette dernière initiée.

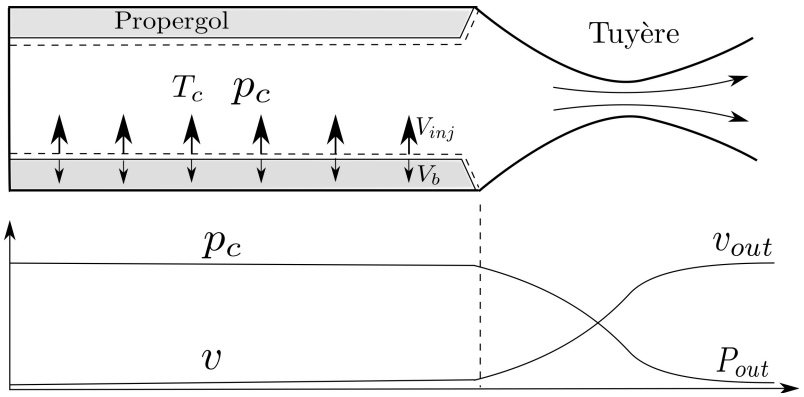


**FIGURE 1.2** – *Schéma simplifié du fonctionnement d'un moteur à propergol solide*

#### 1.1.1.3 Performances globales des moteurs-fusées

La poussée instantanée d'un moteur peut se déterminer en fonction des caractéristiques de l'écoulement et des conditions en sortie de tuyère à un instant donné $t$ de la manière suivante :

$$F(t) = \dot{m}_{out} v_{out} + (p_{out} - p_{ext}) A_s \tag{1.1}$$

où $\dot{m}_{out}$ et $v_{out}$ sont le débit et la vitesse de sortie des gaz éjectés, $p_{out}$ est la pression statique des gaz dans le plan de sortie du moteur, $p_{ext}$ est la pression statique atmosphérique extérieure et $A_s$ est la surface d'éjection. Pour assurer de fortes poussées, l'emploi d'une tuyère est essentiel car elle permet d'obtenir des vitesses de sortie importantes. Comme illustré à la Fig.(1.2), la vitesse des gaz augmente continûment de la chambre de combustion jusqu'en sortie tuyère. La pression et la température diminuent en conséquence. Dans le cas d'une tuyère amorcée, l'écoulement sera subsonique dans le convergent, sonique au niveau du col de tuyère et finalement supersonique dans le divergent. Dans la recherche de performances, la vitesse d'éjection est donc un paramètre clé dépendant des conditions de chambre et des propriétés du gaz [Candel, 1990] :

$$v_{out} = \sqrt{\frac{T_c R}{\mathcal{M}} \frac{2\gamma}{\gamma - 1} \left[ 1 - \left( \frac{p_{out}}{p_c} \right)^{\frac{\gamma - 1}{\gamma}} \right]} \tag{1.2}$$

où $R$ est la constante des gaz parfaits égale à $8,314$ KJ/mol/K, $\gamma$ est le coefficient isentropique et $\mathcal{M}$ est la masse molaire des gaz éjectés. Les conditions de chambre sont définies par la pression $p_c$ et la température $T_c$. Obtenir des hautes températures et des pressions élevées est primordial. Il faut cependant porter attention aux pressions de sortie moteur et extérieure pouvant entraîner des baisses de performances. Trois situations sont envisageables :

La tuyère est sous-détendue si $p_{out} > p_{ext}$
La tuyère est adaptée si $p_{out} = p_{ext}$
La tuyère est sur-détendue si $p_{out} < p_{ext}$

Le cas optimal de fonctionnement est celui de la tuyère adaptée. Une forte sur-détente peut entraîner un décollement de l'écoulement dans la tuyère et des pertes de charges latérales. Il est à noter qu'en fonction de l'altitude de vol, la pression extérieure évolue. Ainsi, pour une tuyère à géométrie fixe et des conditions de chambre inchangées les différentes situations peuvent être rencontrées.
La notion d'efficacité d'un système propulsif est définie au travers d'un critère de performance qui est l'impulsion spécifique ou $I_{sp}$, définie par :

$$I_{sp} = \frac{F}{\dot{m}_{out}\, g_0} \tag{1.3}$$

où $g_0$ est la valeur de l'accélération de la pesanteur calculée au niveau de la mer. L'$I_{sp}$ dont la dimension est celle d'un temps, exprimé le plus souvent en secondes, représente la durée pendant laquelle un kilogramme de combustible produit une poussée nécessaire pour déplacer une masse d'un kilogramme dans le champ gravitationnel terrestre. Autrement dit, à poussée équivalente, un moteur avec une plus grande $I_{sp}$ consommera moins de combustible. La détermination de l'$I_{sp}$ peut se faire pour tous les types de propulsion. Il est bien souvent employé abusivement pour caractériser la capacité énergétique du matériau plus que le système propulsif complet, matériau énergétique et tuyère. L'$I_{sp}$ d'un moteur à propergol solide est de l'ordre de 270s alors que celle d'un propulseur à ergols liquides avoisine par exemple les 320s pour le couple Aerozine/$N_2O_4$ du deuxième étage du lanceur Titan IV. Les meilleures performances sont atteintes pour les ergols hydrogène liquide/oxygène liquide (LOX/LH2) avec une $I_{sp}$ proche de 440s pour les moteurs d'Ariane 5 et de la navette spatiale.
Le principe de fusée à étages, consistant à décomposer le tir en plusieurs phases d'accélération à l'aide de différents systèmes propulsifs séparables, est la solution technologique la plus intéressante pour acheminer une charge utile à très haute altitude. Tous les lanceurs spatiaux modernes sont multi-étages. Les propulseurs à propergol solide offrent généralement une poussée supérieure à celle des moteurs à ergols liquides pour des coûts de fabrication inférieurs. Les MPS sont privilégiés pour le premier étage du lanceur et assurer la première phase de vol tandis que la propulsion liquide est généralement préférée pour les étages supérieurs. Les moteurs à ergols liquides assurent donc la seconde phase du tir, plus longue, bénéficiant d'une impulsion spécifique supérieure et éventuellement d'une modulation de poussée pour faciliter la mise à poste du satellite. Que ce soit pour les lanceurs spatiaux ou pour les applications militaires, les moteurs à propergol solide sont particulièrement appréciés pour leur performance, leur faible encombrement, leur fiabilité et leurs faibles coûts comme détaillé dans §1.1.3.

### 1.1.2 Quelques éléments spécifiques à la propulsion solide

Afin de mieux aborder les problèmes rencontrés en propulsion solide, deux éléments clés d'un MPS doivent être présentés. Dans un premier temps, la nature et la composition du propergol sont détaillées. Dans un second temps, nous décrivons la géométrie interne du moteur qui d'apparence simple évolue au cours du temps et joue un rôle important, notamment sur le contrôle de la poussée.

#### 1.1.2.1 Etude du propergol : formulation, morphologie et combustion

Les performances des MPS reposent en grande partie sur la maîtrise de la composition et de la fabrication du propergol. Deux familles sont habituellement distinguées en fonction de leur composition. Les propergols double-base, ou nitrocellulose, sont les plus anciens. Ils sont constitués de nitrocellulose solide absorbant de la nitroglycérine liquide et éventuellement des additifs. Les éléments oxydants et réducteurs sont réunis dans la même molécule pour former un matériau homogène. Des grains contenant des atomes d'oxygène peuvent également enrichir le mélange. Bien que leurs performances soient correctes, avec une impulsion spécifique de l'ordre de 235s [Sutton and Biblarz, 2001], elles demeurent inférieures à celles des propergols composites utilisés pour les lanceurs actuels. Ces propergols sont constitués d'un mélange hétérogène de charges oxydantes, le comburant, se présentant sous la forme de grains dont la cohésion est assurée par un liant. Ce dernier doit être compatible avec l'oxydant mais aussi supporter des contraintes mécaniques importantes lors du tir. Les liants les plus couramment employés sont constitués de pré-polymères, d'un plastifiant et d'un agent de réticulation qui donne la cohérence aux chaînes moléculaires du pré-polymère. L'ensemble se présente sous la forme d'une gomme dure dont le comportement mécanique est viscoélastique. Si le liant peut être utilisé comme seul combustible de la composition, l'ajout de particules métalliques en tant que réducteur est souvent employé afin d'augmenter la densité du propergol et d'obtenir de meilleures performances avec un couple oxydant/réducteur plus énergétique. De façon non exhaustive, nous présentons la nomenclature choisie en France pour détailler la composition des propergols composites :

- Un préfixe pour le pré-polymère :
  buta- : polybutadiène
  iso- : polyuréthane
  sili- : silicone
- Un infixe pour l'oxydant :
  -l- : perchlorate d'ammonium (grains de PA) $NH_4ClO_4$
  -n- : nitrate d'ammonium $NH_4NO_4$
  -p- : perchlorate de potassium $KClO_4$

- Un suffixe pour la charge métallique :
  -ite : pas ou peu de particules
  -abe : béryllium
  -ère : bore
  -ane : aluminium

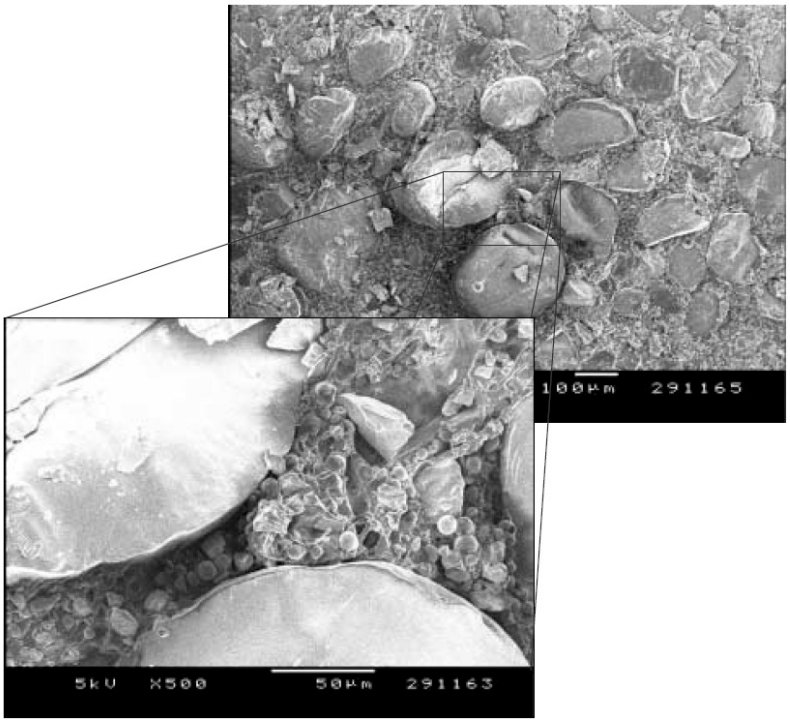


**FIGURE 1.3** – *Photographies au microscope à balayage électronique d'une coupe de propergol composite [Orlandi, 2002]*

Concernant le pré-polymère, deux polybutadiènes sont intéressants : Le PBHT pour polybutadiène hydroxytéléchélique et le PBAN pour polybutadiène-acide nitrique-acide acrylonitrile. Le couple PBHT/PA est le plus souvent employé car il offre une tenue thermique satisfaisante à température ambiante et de bonnes performances en générant une grande quantité d'oxygène : de l'ordre de 34% en masse pour "l'oxygène libre" [Davenas, 1989]. Son coût de production est aussi modéré.
L'aspect hétérogène d'un propergol est souligné par la Fig.(1.3) dans laquelle les grains de PA noyés dans le liant sont parfaitement discernables. Le taux de chargement en masse de PA avoisine les 70% dans la plupart des compositions. A ce taux, il est nécessaire de travailler sur différentes tailles de grains i.e. leur granulométrie afin de pouvoir loger de plus petits grains entre les gros. En terme de cristallographie, on parlera de compacité ce qui revient à étudier le taux d'occupation réel de l'espace. Dans les deux visualisations par balayage électronique, deux tailles de grains sont visibles : les plus volumineux et globalement sphériques avec un diamètre compris entre 150-200$\mu m$ et des plus petits avec une diamètre approximatif de 50$\mu m$. Dans le cas d'un propergol incorporant des charges métalliques, ces dernières sont la plupart du temps plus petites que les gros grains de PA et ont ainsi tendance à s'intercaler entre eux dans ce que l'on nomme des poches [Cohen, 1983]. La granulométrie des particules métalliques communément employée est micrométrique même si de nouvelles compositions présentent dorénavant des chargements nanométriques comme évoqué dans §1.1.4. Finalement, le liant qui n'est pas de nature cristalline vient combler l'espace libre entre grains et particules.
La combustion d'un propergol de type PBHT/PA se décompose en plusieurs mécanismes réactionnels comme illustré en Fig.(1.4). Dans une plage de température comprise entre 607K et 720K, les grains de PA se décomposent via le phénomène de pyrolyse et les constituants gazeux résultants, amoniaque et acide perchlorique, vont réagir dans une flamme de prémélange [Kubota, 2002] située très proche de la surface (de l'ordre de quelques $\mu m$) :

$$\begin{aligned} NH_4ClO_4 &\Rightarrow NH_3 + HClO_4 \\ HClO_4 &\Rightarrow HCl + 2O_2 \end{aligned} \tag{1.4}$$

La température augmentant, le liant va se sublimer et se décomposer en différents composants, principalement des hydrocarbures [Cai et al., 2008] qui vont réagir au sein d'une flamme de diffusion avec les atomes d'oxygène excédentaires issus de la décomposition des grains de PA. Comme présenté dans [Beckstead, 2002], les produits de combustion que l'on appelle plus communément les gaz de propergol sont essentiellement composés de $CO$, $CO_2$, $H_2O$, $H_2$, $HCl$ et $N_2$. La chaleur dégagée par la flamme de diffusion entretient la pyrolyse des grains de PA ce qui conduit au phénomène d'auto-combustion du matériau.

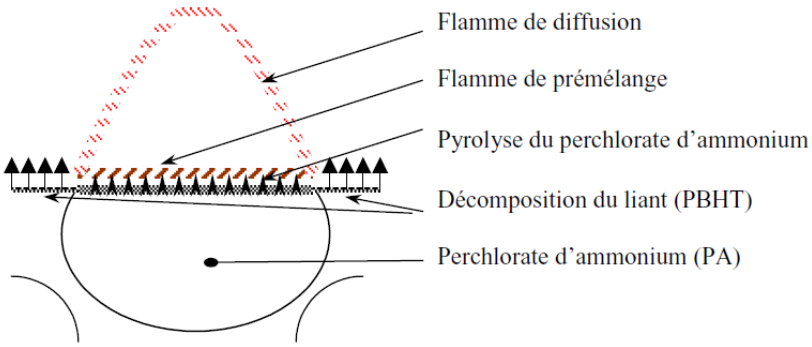


**FIGURE 1.4** – *Schéma de principe de la combustion d'un propergol PBHT/PA [Godon, 1983]*

Afin d'augmenter la température de ces produits de combustion et finalement obtenir une impulsion spécifique plus grande, des particules métalliques sont souvent ajoutées dans le propergol. D'un point de vue énergétique, le béryllium offre les meilleures performances mais présente l'inconvénient de générer des produits de combustion très toxiques. C'est pourquoi on lui préfère l'aluminium dont la combustion ne génère pas de produits toxiques et qui est par ailleurs moins cher. On parle alors de propergols aluminisés ou encore de Butalane dans la terminologie française. Au cours de la régression du propergol, les particules d'aluminium émergent à la surface de combustion, fondent, s'agglomèrent pour une partie d'entre elles puis s'allument et brûlent tout en étant entraînées dans l'écoulement. Constituant un thème majeur de cette thèse, ces différents mécanismes sont décrits en détails dans §2.1. L'aluminium liquide des gouttes s'évapore et brûle dans une flamme de diffusion alimentée par les gaz de propergol oxydants. De cette combustion résulte alors des résidus d'alumine $Al_2O_3$ inertes qui vont se disperser dans l'ensemble de la chambre sous la forme d'un brouillard de gouttes.

#### 1.1.2.2 Géométrie interne évolutive du moteur

Une des particularités de la propulsion repose sur la régression du propergol modifiant la géométrie de la chambre au cours du temps. Dans des conditions normales de fonctionnement, le propergol régresse à une vitesse $V_b$ de l'ordre de la dizaine de mm/s fonction uniquement de la pression de la chambre. Cette dépendance s'exprime par la loi de Vieille :

$$V_b = a p_c^n \tag{1.5}$$

où $p_c$ est souvent exprimée en bars et $a$ et $n$ sont des constantes caractéristiques du propergol à caractériser par des essais balistiques. L'exposant $n$ est généralement compris entre $0,3$ et $0,7$ [Turner, 2009]. Il doit être inférieur à 1 afin d'assurer un débit massique des produits de combustion $\dot{m}_{prop}$ inférieur au débit de la tuyère. A cette condition, la pression chambre ne diverge pas et un régime de fonctionnement permanent stable est atteint. Le débit des gaz brûlés est calculé en fonction de la vitesse de régression, de la surface de combustion $A_{comb}$ et de la masse volumique de propergol $\rho_{prop}$ suivant la relation :

$$\dot{m}_{prop} = \rho_{prop}\, A_{comb}\, V_b \tag{1.6}$$

A partir de la conservation de la masse, il est possible de donner des valeurs typiques pour la vitesse des gaz éjectés au niveau de la surface. Pour un rapport de masses volumiques entre solide et gaz de l'ordre de $10^3$, les vitesses obtenues sont de quelques m/s. En régime établi, $\dot{m}_{prop} = \dot{m}_{out}$.
Bien que la poussée d'un MPS ne puisse pas être modulée en temps réel, elle peut cependant être définie à l'avance en jouant sur le débit des gaz produits. Des propergols multi-compositions permettent d'obtenir des vitesses de régression du bloc différentes à plusieurs instants du tir. Mais, dans une grande majorité des cas, le débit des gaz produits est contrôlé au travers de la surface de

combustion et c'est finalement au travers d'un travail sur la géométrie du bloc de propergol que des courbes de poussée sont établies.

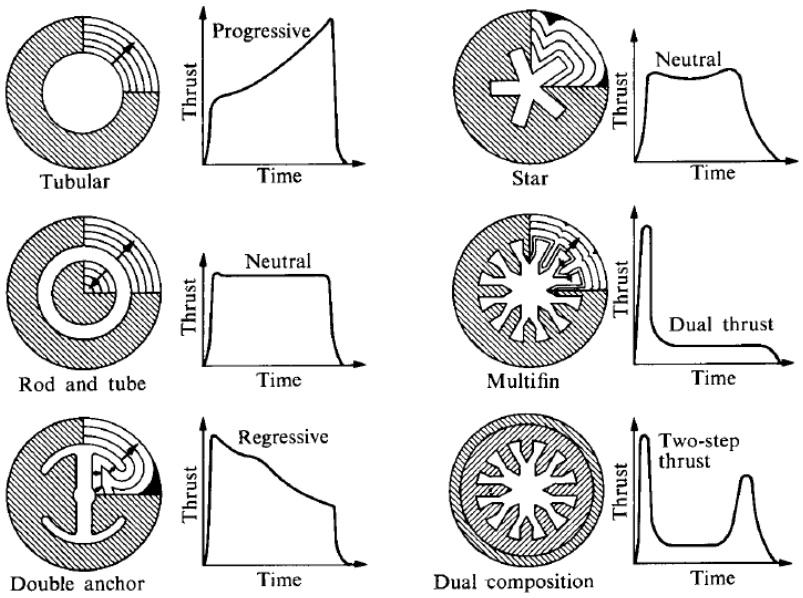


**FIGURE 1.5** – *Différents profils de propergol à combustion radiale et courbes de poussée associées [Shafer, 1959]*

La combustion du propergol peut être frontale comme c'est le cas pour les blocs dit "cigarette" utilisés pour la propulsion des missiles tactiques. Pour les propergols à combustion radiale, la géométrie interne des moteurs présente une section circulaire avec en son centre un canal par lequel circule les gaz jusqu'à la tuyère. La forme du profil du canal est alors déterminé lors de la conception. Des exemples de géométrie interne et les lois de poussée correspondantes sont donnés dans la Fig.(1.5). Pour exemple, on citera les formes cylindrique, conique mais aussi les profils étoilés (à N branches, de préférence N impair pour casser la symétrie de l'écoulement et éviter le développement d'instabilités)... Pour ces différentes configurations, trois types de combustion et d'évolution de pression au cours du temps sont possibles : 1- La combustion progressive au cours de laquelle la surface et la pression ne cessent d'augmenter 2- La combustion neutre pour laquelle les deux restent constantes 3- La combustion régressive au cours de laquelle surface de combustion et pression décroissent.

### 1.1.3 Applications et problèmes rencontrés en propulsion solide

Les moteurs à propergol solide peuvent être employés à des fins civils ou militaires. Leurs utilisations ainsi que leur environnement déterminent le cahier des charges guidant leur conception. Nous présentons ici les différentes applications possibles puis les principaux problèmes rencontrés.

#### 1.1.3.1 Les applications militaires

Les moteurs à propergol solide sont couramment utilisés pour propulser des missiles dotés d'une charge explosive dite conventionnelle mais aussi pour ceux développés dans le cadre de la dissuasion nucléaire. La possibilité d'utiliser ces systèmes d'armes immédiatement, même après une longue période de stockage, explique la place occupée par la propulsion solide dans le domaine militaire. Aussi, la compacité des moteurs liée à un rapport densité d'énergie sur volume occupé élevé facilite leur embarquement à bord de sous-marins et d'avions.
Les missiles tactiques ont une portée de l'ordre du kilomètre à plusieurs centaines de kilomètres et couvrent de nombreuses missions. On citera comme exemple et de façon non exhaustive le missile mer-mer EXOCET, l'anti-chars MILAN ou encore l'engin air-air MICA. Ces missiles sont caractérisés par des moteurs de petites tailles et de faibles rapports longueur sur diamètre de chambre.
Les missiles dits stratégiques à la portée plus importante, de l'ordre de plusieurs milliers de km, sont destinés à délivrer des têtes nucléaires. Destinés à remplacer le M45, les missiles M51, qui sont développés en maîtrise d'oeuvre par Airbus Defence & Space, sont tirés depuis des sous-marins nucléaires lanceurs d'engins (SNLE) en plongée et en mouvement. Le M51 d'une longueur de 12m

**FIGURE 1.6** – *Tir du missile M51 depuis le sous-marin lanceurs d'engins Le Terrible ©DGA*

et d'une masse de plus de 50t est conçu pour couvrir une distance de plus 10 000km avec une vitesse de croisière de 19km/s. Le système propulsif construit par SAFRAN HERAKLES est constitué de quatre étages équipés de moteurs à propergol solide développant 1800kN de poussée.

### 1.1.3.2 Les applications civils

Dans le domaine spatial, l'utilisation de la propulsion solide apparaît comme un candidat de choix pour produire les fortes poussées requises pour vaincre l'attraction terrestre et pour la mise en orbite de charges utiles à moindres coûts. Nous proposons une présentation succincte de plusieurs moteurs équipant différents lanceurs européens.

**FIGURE 1.7** – *Lanceur Ariane 5 au décollage et lanceur VEGA rejoignant le pas de tir ©CNES*

**Le P230 du lanceur Ariane 5 : exemple d'un moteur segmenté**
Le lanceur européen Ariane 5 est classé dans la catégorie des lanceurs lourds. Il compte trois étages pour un poids au décollage de 750t. Le premier, appelé étage principal cryotechnique (EPC) est composé du moteur à ergols liquides Vulcain 2 et de ses deux réservoirs d'oxygène liquide LOX et d'hydrogène liquide LH2. Il est allumé quelques secondes avant le décollage et assure seul la propulsion du lanceur dans la seconde phase de vol. Cependant, il fournit au décollage moins de 10% de la poussée nécessaire. Aussi, deux étages d'accélération à poudre (EAP) situés de part et d'autre du lanceur assurent le reste de la poussée. Un EAP est composé d'un moteur à propergol solide appelé P230 embarquant près de 240t de propergol dans une structure faisant 31.6m de haut pour 3.05m de diamètre. Chaque moteur, aussi appelé communément "booster", délivre une poussée maximale de 7000kN avec un temps de fonctionnement de 132s pour une altitude atteinte de

60km. Les moteurs sont séparés du lanceur aux moyens de dispositifs pyrotechniques et retombent dans l'océan Atlantique.
Le moteur P230 est le parfait exemple d'un moteur de grande taille avec un rapport d'aspect (ou allongement) longueur/rayon important. Comme représenté en Fig.(1.8), le chargement est réparti en plusieurs blocs appelés segments et nommés S1, S2 et S3. Le segment S1, positionné au fond avant, est de forme étoilé pour offrir une poussée maximale au décollage. Les deux autres segments de forme cylindro-conique sont séparés par des protections thermiques (ou encore PTF pour Protection Thermique de Face) qui ont pour but de limiter le flux thermique entre les faces latérales de chaque segment et empêcher le bloc de brûler sur ces faces. Des protections thermiques internes (PTI) protègent également la structure du moteur composée essentiellement d'acier. Il est à noter que les conditions nominales de la chambre avoisinent les 3400K et une pression allant de 4.5MPa jusqu'à plus de 6.0MPa. La segmentation du propergol répond autant à des impératifs technologiques que ballistiques. En effet, la coulée d'un bloc de propergol de grande taille nécessite des moyens de production importants, il a été privilégié de limiter la taille des segments à fabriquer. L'adoption d'un bloc étoilé et de segments cylindro-coniques assure une allure bi-régime à la courbe de poussée du moteur comme illustré en Fig.(1.9).
Le propergol du P230 est une Butalane avec une composition en masse de PBHT/PA de 14%/68%. Des particules d'aluminium sont introduites à hauteur de 18% afin d'améliorer les performances du moteur comme évoqué dans §1.1.2.1.

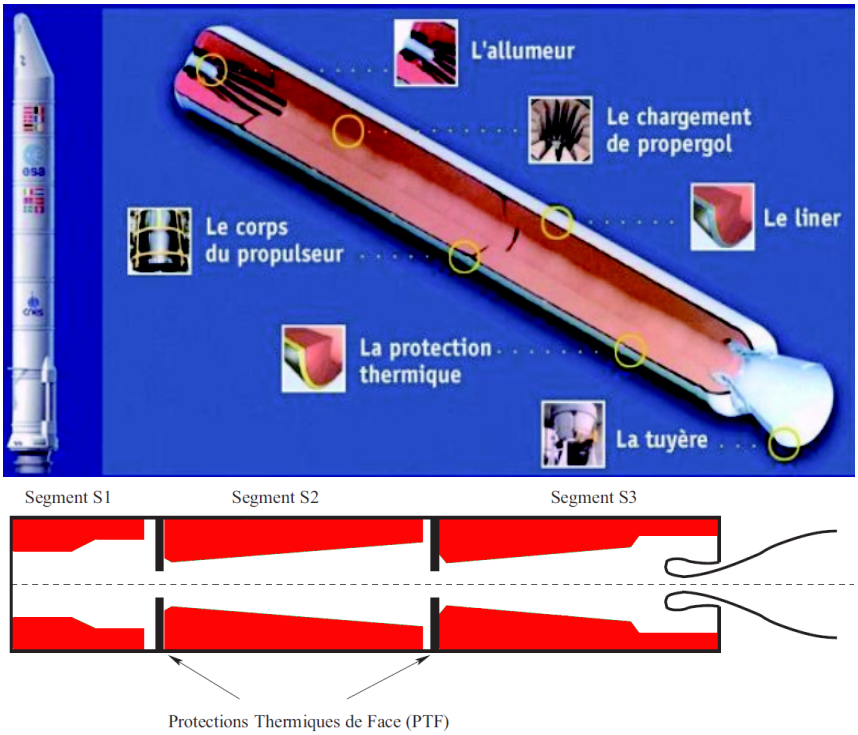


**FIGURE 1.8** – *Vue éclatée du moteur P230 ©HERAKLES et son schéma simplifié*

**Le P80 du lanceur VEGA : un moteur monobloc de nouvelle génération**
Développé et financé par l'Agence Spatiale Européenne, le nouveau lanceur européen monocorps VEGA, conçu pour répondre au marché des petites missions, a effectué son premier lancement le 13 février 2012. Ce lanceur léger permet de placer en orbite basse une charge utile de 300kg à 2.3t ou 1.5t en orbite polaire. Au-delà de compléter la gamme d'Arianespace, le P80 est présenté comme un démonstrateur de nouvelles technologies à bas coût avec le développement du moteur à propergol solide P80 constituant le premier étage et dont les maîtrises d'ouvrage et d'oeuvre est respectivement assuré par la Direction des Lanceurs du CNES et par l'industriel AVIO. Sa structure externe (ou virole) en composite à filament bobiné en époxyde de carbone [Biagi et al., 2011] allège la structure. Les nouveaux vérins électromécaniques retenus pour diriger sa tuyère et orienter la poussée apparaissent comme un système plus simple que le mécanisme hydro-électrique d'Ariane 5. D'une masse totale de 95t avec un chargement de 88t, d'une longueur de 12m et d'un diamètre de 3m, le moteur P80 est d'une architecture plus simple que les moteurs segmentés d'Ariane 5 car coulé en un seul bloc. Son propergol, une butalane 12/69 proche de celui du P230 avec un

chargement en particules d'aluminium porté à 19%, lui permet de délivrer une poussée maximale de 3040kN et de fonctionner pendant 110s.

### 1.1.4 Problèmes et axes de recherche majeurs

#### 1.1.4.1 Fiabilité et sécurité liées à la tenue mécanique des propergols

La propulsion solide n'est pas totalement exempte de problèmes concernant la fiabilité et la sécurité. Les principales causes de défaillances des moteurs à propergol solide sont liées à la tenue mécanique des chargements. En effet, tout au long de leur vie, les chargements sont soumis à des sollicitations mécaniques et thermiques pouvant entraîner des ruptures du bloc ou encore de la liaison entre la structure et le propergol. La conséquence majeure est l'augmentation de la surface de combustion. Une rupture du bloc conduit à une élévation de la pression, une modification de la poussée et du temps de combustion voire une destruction de la structure au-delà de la pression d'éclatement. Une détérioration de la liaison propergol-structure peut être à l'origine d'une combustion dans la zone de décollement et donc d'un échauffement anormal de la structure. Tout au long de son cycle de vie (de la fabrication au tir), le chargement est soumis à différentes sollicitations mécaniques : retrait thermique après cuisson, vibrations et chocs au transport, fluage au stockage, mise sous pression et forte expansion au tir. L'ensemble de ces difficultés exige le développement de solutions techniques lors de la conception tel que la segmentation du propergol lorsque l'allongement de ce dernier est trop important. D'autres études sont également essentielles comme celle de la vulnérabilité du chargement portant sur des sollicitations non fonctionnelles (impact, chute, incendie).

#### 1.1.4.2 Problématiques des instabilités moteur pour le MPS d'Ariane 5

Un autre volet de recherches en propulsion solide concerne les instabilités de fonctionnement. Sur différentes configurations comme le P230 d'Ariane 5, les moteurs de la fusée Titan IV et de la navette spatiale, il a été relevé, durant une partie de leur fonctionnement, un comportement instable caractérisé par des fluctuations de poussée. Les fluctuations de poussée étant corrélées à la pression interne, ces instabilités s'expliquent par l'apparition d'Oscillations De Pression (ODP) dans la chambre de combustion. Pour les moteurs de grandes tailles, notamment les engins civils, les ODP ne remettent pas en cause leur intégrité mais demeurent une préoccupation.
Dans le cas des EAP d'Ariane 5, ces oscillations sont indésirables car les vibrations engendrées se transmettant à l'ensemble de la structure et pouvant potentiellement endommager la charge utile en fonction de leur fréquence et de leur amplitude. En dépit du système DIAS (DIspositif ASsouplisseur) d'Ariane 5 limitant la transmission de ces vibrations au corps central, la compréhension et la réduction des ODP restent un thème de recherches actif pour le lanceur européen et ses successeurs. En effet, l'ajout de ce type de systèmes augmente la charge inerte de la fusée et les coûts de fabrication. Les fréquences des ODP correspondent à celles des modes acoustiques longitudinaux de la chambre et leurs amplitudes peuvent atteindre plus de 300mbar comme illustré dans Fig.(1.9). Des capteurs de pression situés au fond avant et arrière du moteur P230 ont confirmé l'apparition de ce phénomène autour de quatre instants de fonctionnement [Ballereau et al., 2003].

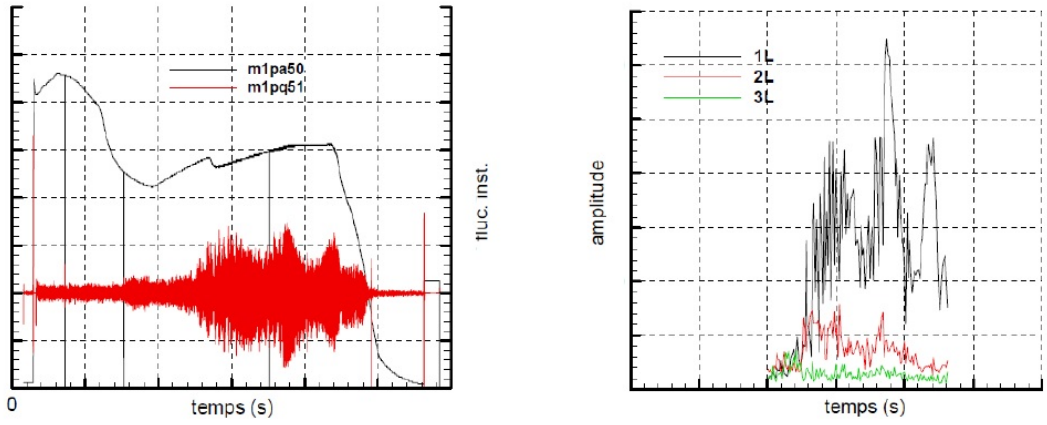


**FIGURE 1.9** – *Signal de pression et fluctuations instantanées (gauche) et amplitude des instabilités pour les trois premiers modes acoustiques de l'EAP1 au cours d'un tir Ariane 5 ©ONERA [Prévost et al., 2013]*

#### 1.1.4.3 Problèmes liés à la présence de particules dans l'écoulement

Issus de la combustion des particules d'aluminium, les résidus d'alumine présents sous la forme d'un brouillard de gouttes dans la chambre sont de taille nanométrique à micrométrique. Du fait de leur inertie, les particules d'alumine de plus grande taille ne suivent pas instantanément l'écoulement gazeux ce qui les amène à impacter les parois du moteur et plus particulièrement le convergent de la tuyère. Une partie de ces particules oxydées est éjectée par la tuyère. Les particules qui ne peuvent accélérer aussi vite que le gaz au sein de la tuyère tendent à ralentir l'écoulement. Cet effet se traduit par des pertes d'impulsion spécifique [Kuentzmann, 1973b], réduisant ainsi les performances du moteur.
L'autre partie des particules d'alumine est soit déposée sur la paroi de la tuyère soit piégée dans le fond arrière du moteur sous la forme d'une flaque d'alumine [Cesco, 1997; Godfroy and Guéry, 1997; Villedieu et al., 2000]. Ce dépôt est important, de l'ordre de 2t pour le P230 [Fabignon, 1997]. Notons que ce dépôt est très faible pour le moteur P80. De plus, le détachement possible d'une partie de la flaque d'alumine puis son passage dans la tuyère peut éroder sa structure [Burakov and Sandu, 1997].
L'identification de missiles par la caractérisation de la signature infrarouge du jet de tuyère [Mahulikar et al., 2007] est un axe de recherches majeur pour le domaine de la défense. La prise en compte des particules d'alumine est capitale car elles participent notablement au bilan radiatif de ces jets [Kovalev, 2002a]. La détermination des propriétés optiques des résidus d'alumine portés à haute température dans un écoulement constitué de produits de combustion est un sujet de recherche particulièrement actif [Gossé, 2004].
La mise en évidence de l'impact des résidus d'alumine sur les structures hydrodynamiques de l'écoulement ainsi que le rôle de la combustion des gouttes d'aluminium sur le couplage aéroacoustique de la chambre ont été des résultats très importants du programme ASSM. Il a notamment été souligné que la présence de cette phase dispersée a un impact sensible sur les niveaux d'instabilités de l'écoulement interne [Dupays et al., 1996; Dupays et al., 2000].

Dans le cadre de cette thèse, nous nous intéressons spécifiquement à l'impact des particules sur les instabilités de fonctionnement et leur rôle sur les niveaux des ODP pour deux raisons :
- Dans le cas du moteur P80, des oscillations de poussée ont été relevées dans la première phase de son fonctionnement malgré l'absence de protections thermiques. Les récentes études ont mis en évidence l'importance de la combustion des particules d'aluminium sur la stabilité du moteur comme détaillé dans §2.2.2.
- C'est un challenge d'un point de vue numérique car le couplage entre les instabilités hydrodynamiques, l'acoustique et la combustion des particules est complexe à capturer comme souligné dans §2.2.1. Pour le développement du futur lanceur Ariane 6, l'étude de la stabilité de fonctionnement demeure un axe de recherches majeur. Il est donc crucial de se doter des outils numériques pour la simulation des écoulements diphasiques réactifs.

Dans la partie suivante, nous présentons donc les principaux mécanismes de génération des instabilités de l'écoulement interne ainsi que leurs couplages. Les phénomènes pouvant interagir avec ces instabilités tels que la turbulence ou la présence de particules dans l'écoulement sont également exposés.

## 1.2 Etude des instabilités de l'écoulement interne

La prédiction théorique des ODP repose sur une description fine de la physique, par ailleurs complexe, de l'écoulement interne d'un moteur à propergol solide. Dans un premier temps, l'ensemble des mécanismes, identifiés à ce jour, à l'origine de ces oscillations de pression sont présentés. Puis, il s'agit d'évaluer les différents couplages possibles entre ces phénomènes et finalement de déterminer la contribution de chacun en tant que générateurs, amplificateurs ou bien amortisseurs de ces instabilités.

### 1.2.1 Acoustique de la chambre et classification des instabilités

Nous avons auparavant utilisé le terme de mode acoustique de la chambre. Il convient alors de le définir et de classer les instabilités qui lui sont rattachées. Si $\lambda$ est la longueur d'onde de l'instabilité et $L$ une longueur caractéristique du moteur, il est possible de classer les instabilités en deux catégories.
Dans le cas où $\lambda/L >> 1$, il s'agit d'un mode non acoustique dit en volume ou encore appelé L*. Ayant lieu à basses fréquences, de l'ordre de quelques Hz, les fluctuations de pression sont identiques en tout point de la chambre. Ces instabilités apparaissent essentiellement à basse pression et quand le rapport de la surface de combustion sur l'aire au col de tuyère est faible comme c'est le cas en début de tir. Elles ont pour conséquence des extinctions ou des réallumages du moteur.
Dans le cas où $\lambda/L \approx 1$, il s'agit d'une instabilité organisée autour d'un des modes acoustique de la chambre. Ces modes caractéristiques peuvent être classés en trois catégories : longitudinaux, tangentiels et radiaux. Déduits de la résolution de l'équation d'Helmholtz pour une cavité cylindrique fermée sans écoulement de longueur L et de rayon R, les fréquences acoustiques sont données par la relation suivante [Barrere et al., 1960] :

$$f_{mnq} = \frac{c_0}{2}\sqrt{\left(\frac{\beta_{mn}}{R}\right)^2 + \left(\frac{q}{L}\right)^2} \tag{1.7}$$

où $c_0$ est la vitesse du son et $\beta_{mn}$ sont les coefficients définissant les différents modes dits transverses, i.e. radiaux ou tangentiaux [Bourasseau, 1980] ($q \neq 0$ : longitudinal, $n \neq 0$ : tangentiel et $m \neq 0$ : radial). Les instabilités transverses caractérisent les petits moteurs avec un rapport d'aspect $L/R$ faible alors que les instabilités longitudinales s'observent pour des moteurs élancés et de grandes tailles. Les premières sont à éviter car elles ont des conséquences souvent fatales pouvant conduire à une dérive brutale de la pression chambre, phénomène que l'on détaillera dans §1.2.2. Des solutions techniques existent et reposent principalement sur la géométrie du chargement et sa composition [Harrje and Reardon, 1972; Evans and Smith, 1979; Price, 1984]. Les instabilités longitudinales sont celles qui nous intéressent dans ce travail car elles sont directement à l'origine des oscillations de poussée des grands moteurs tel que le P230. En effet, les fréquences des modes longitudinaux correspondent bien à celles des ODP. Cependant, prises en compte seules, les instabilités acoustiques ne permettent pas d'expliquer le phénomène de glissement en fréquence marqué sur une courte période (une bouffée) illustré dans Fig.(1.15) et expliqué dans §1.2.3.2. Comme par ailleurs, l'amplitude des ODP est particulièrement importante, il a donc été suspecté différentes sources excitatrices des modes acoustiques.

### 1.2.2 Instabilités de combustion et réponse du propergol

Le terme instabilité renvoie souvent aux cas des instabilités de combustion mettant en jeu des fluctuations de dégagement de chaleur en phase avec un mode acoustique et donnant lieu à une instabilité acoustique. Dans le cas particulier d'un moteur à propergol solide, de petites perturbations locales de la pression interne peuvent entrainer un changement dans la dynamique de régression du propergol comme indiqué par la loi de Vieille Eq.(1.5). On parlera alors de réponse du propergol aux variations de pression, qui sont principalement d'origine acoustique. Il s'agit alors de déterminer le couplage entre l'acoustique de la chambre et le comportement du propergol qui peut en réponse amplifier ces perturbations, et ce pour certaines fréquences comme présenté dans [Vuillot and Lupoglazoff, 1996]. Ce couplage s'exprime au travers d'une fonction de transfert $R_{ep}$ que l'on peut exprimer en fonction de la fréquence d'excitation $f$ :

$$R_{ep}(f) = \frac{\dot{m}'_{prop}/\dot{m}_{prop}}{p'/p} \tag{1.8}$$

où $\dot{m}_{prop}$ et $\dot{m}'_{prop}$ sont respectivement le débit massique du propergol et sa fluctuation et $p'$ la fluctuation de la pression interne $p$. La combustion d'un matériau énergétique composite, hétérogène en surface, peut également induire de faibles variations de débit et amplifier par rétroaction les perturbations de pression. Pour les moteurs de petites tailles équipant les missiles tactiques, les fréquences acoustiques transverses sont élevées avec des valeurs de l'ordre de la dizaine de kHz. Dans ce cas, la réponse du propergol est importante ce qui peut mener à une augmentation subite et importante de la pression chambre et conduire à une destruction du moteur. Dans le cas du P230, les fréquences d'excitation du propergol correspondent à des modes acoustiques de l'ordre de quelques dizaines de Hz. Pour ces valeurs, il est apparu que la contribution de la réponse du propergol était minoritaire [Gallier et al., 2002; Fabignon et al., 2003a]. Ainsi, pour des moteurs de grandes tailles, la source des instabilités relève principalement de la structure hydrodynamique de l'écoulement et de son couplage avec l'acoustique de la chambre. Dans [Kuentzmann, 1995], Kuentzmann parle plus précisément d'instabilités de fonctionnement à mettre en lien avec la géométrie évolutive du moteur et à la nature instationnaire de l'écoulement.

### 1.2.3 Mécanisme des instabilités aéroacoustiques

C'est au début des années 70 que l'on retrouve pour la première fois des travaux [Flandro, 1973] faisant état d'un couplage possible entre des structures tourbillonnaires et l'acoustique d'une chambre de moteur à propergol solide. Dans les années 80, la mise en évidence d'instabilités sur les moteurs américains du lanceur Titan 34D [Brown et al., 1981] et de la navette spatiale est venue alimenter la thèse d'un phénomène destabilisant purement aérodynamique. Différentes recherches et observations expérimentales aux Etats-Unis ont suivies et validées cette hypothèse [Nomoto and Culick, 1982; Flatau and VanMoorhem, 1990]. Côté français, les connaissances et l'expérience pour les grands moteurs segmentés étaient limitées avant le lancement du programme ASSM. Les études menées par Vuillot [Vuillot, 1995; Vuillot and Lupoglazoff, 1996] ont mis en avant trois mécanismes générateurs de détachements tourbillonnaires pouvant se coupler aux modes acoustiques de la chambre et engendrer des oscillations de pression de fortes amplitudes ; on parle alors de couplage ou encore d'accrochage aéroacoustique comme détaillé dans §1.2.3.2. Ces mécanismes, nommés également Vortex Shedding, sont purement aérodynamiques et existent indépendemment de toutes considérations réactive et multiphasique de l'écoulement. Ces instabilités ont d'ailleurs été observées sur des montages "gaz froids", certes avec des niveaux plus faibles.

#### 1.2.3.1 Les Vortex Shedding, instabilités purement aérodynamiques

L'étude d'une chambre de combustion ne se résume pas à celle d'une géométrie interne cylindrique et d'un écoulement stationnaire. Au cours du fonctionnement, des zones de cisaillement de l'écoulement sont susceptibles d'apparaître et d'être sources de deux types de structures tourbillonnaires pouvant se coupler à l'acoustique de la chambre. La terminologie consacrée a été proposée au cours du programme ASSM par [Vuillot and Lupoglazoff, 1996] :
– Vortex Shedding d'Angle
– Vortex Shedding d'Obstacle
Le troisième type de détachement tourbillonnaire n'est quant à lui pas à mettre sur le compte de discontinuités géométriques. Il s'agit du Vortex Shedding Pariétal qui est une instabilité intrinsèque d'un écoulement à injection pariétal.

**Le Vortex Shedding d'Angle (VSA)**
Ce détachement tourbillonnaire se produit quand l'écoulement rencontre une brusque variation de géométrie du propergol provoquant une couche de cisaillement. Cette situation est notamment rencontrée à la fin du bloc de propergol où ce dernier peut présenter un chanfrein ou une variation de section marquée. Comme présenté en Fig.(1.11), les structures tourbillonnaires sont créées au niveau du point anguleux à fréquence donnée comme cela est le cas pour une marche descendante. Dans le cas d'un moteur à propergol solide, la théorie proposée par [Flandro, 1986] précise que ces structures vont impacter la zone de la tuyère et générer une onde acoustique réfléchie qui à son tour va destabiliser la couche de cisaillement.
Un grand nombre d'essais ont mis en évidence le phénomène sur différents montages de démonstration : les moteurs C1, étudiés par [Dupays, 1996] et le montage en gaz froid VIOLETTE présentant une géométrie angulaire avant la sortie tuyère [Goncalves de Miranda, 2000]. Des simulations numériques [Lupoglazoff and Vuillot, 1992,Dupays, 1996,Lupoglazoff and Vuillot, 1998] ont également complété et confirmé ces observations. Les études menées par [Ribereau and Le Breton, 1995] ont

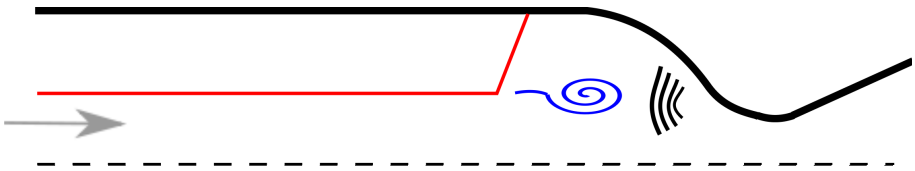

**FIGURE 1.10** – *Illustration du VSA*

aussi permis d'attribuer au VSA les problèmes rencontrés par un moteur militaire alors que la source des instabilités avait été initialement mise sur le compte d'instabilités de combustion.

**Le Vortex Shedding d'Obstacle (VSO)**
La présence d'un obstacle dans l'écoulement participe à la formation d'une couche de cisaillement dont la destabilisation conduit à un lâcher de tourbillons à fréquence donnée. L'existence du VSO a été clairement démontrée tant par des moyens expérimentaux que par des simulations numériques. Ce mode d'instabilité a pour un temps été suspecté d'être la source principale des ODP des grands moteurs segmentés américains et européens. En effet, les protections thermiques entre blocs de propergols et leur émergence au fur et à mesure de la régression du propergol se présentent comme des obstacles dans l'écoulement. Cependant, des campagnes d'essais sur des maquettes à échelle réduite représentatives du moteur P230 [Traineau et al., 1997] ont finalement montré que le VSO n'était pas prépondérant dans les niveaux d'instabilités moteur. En parallèle, la simulation numérique [Vuillot and Lupoglazoff, 1996] a corroboré cette observation. De nombreuses études [Prévost et al., 2000a; Ballereau et al., 2003] ont également porté sur l'influence de la position et de la forme des protections thermiques qui sont particulièrement difficiles à déterminer en environnement moteur, celles-ci étant fléchies par l'écoulement et partiellement érodées, voire même parfois partiellement déchirées.

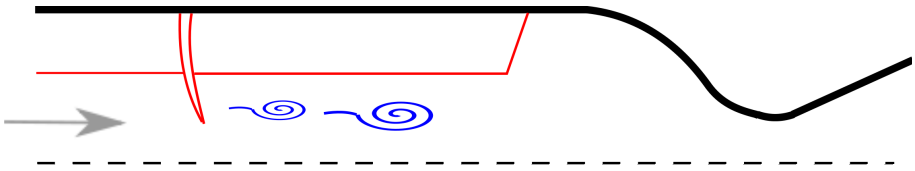

**FIGURE 1.11** – *Illustration du VSO*

**Le Vortex Shedding Pariétal (VSP), instabilité intrinsèque de l'écoulement**
Contrairement aux VSO et VSA, cette instabilité n'est pas initiée par une couche de cisaillement mais prend naissance aux abords des parois débitantes du propergol. Ce détachement tourbillonnaire pariétal a été découvert en 1969 par [Varapaev and Yagodkin, 1969] sur des configurations académiques. C'est au cours du programme ASSM et grâce aux travaux de [Lupoglazoff and Vuillot, 1996] que ce mécanisme a été mis en lumière par la simulation numérique.
A partir de la fin des années 90, des études théoriques de stabilité [Casalis, 1998; Chedevergne, 2007] ont été proposées et ont établi que cette instabilité était de nature purement hydrodynamique, caractéristique d'un écoulement de type Taylor-Culick [Taylor, 1956; Culick, 1966]. Ce dernier se caractérise par l'injection pariétale d'un fluide incompressible dans une configuration cylindrique suivi d'une réorientation axiale de l'écoulement comme illustré en Fig.(1.12). C'est la confluence de l'écoulement pariétal avec l'écoulement longitudinal amont qui créée un rotationnel au niveau de la paroi s'organisant par la suite en structures cohérentes. L'étude de stabilité linéaire menée dans les travaux [Griffond et al., 2000; Griffond, 2001] a souligné que l'allongement du moteur (ratio $L/R$ où $L$ est la longueur du propergol et $R$ est le rayon du canal) est un paramètre clé et a montré l'existence d'une abscisse critique $x^*$ à partir de laquelle l'écoulement peut être destabilisé. L'écoulement génère donc sa propre instabilité dont l'amplitude va croître selon la coordonnée longitudinale. Comme illustré par la Fig.(1.13), le spectre des fréquences des structures hydrodynamiques est continu a contrario des modes acoustiques de la chambre qui s'établissent à des valeurs précises et fixes. Les configurations moteur sujettes à ce type d'instabilité doivent répondre au critère géométrique suivant :

$$L > x^* R, \quad x^* \approx 8 \tag{1.9}$$

Les caractéristiques données ci-dessus sont celles d'un VSP plan. En conditions réelles, l'écoulement de Taylor axisymétrique conduit à un spectre discret et la notion d'abscisse critique n'a plus de sens.

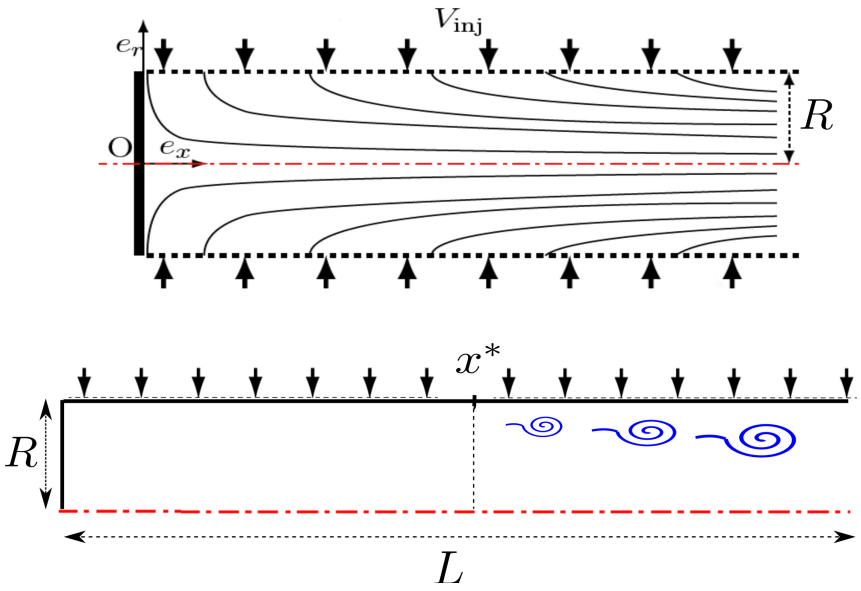


**FIGURE 1.12** – *Ecoulement de Taylor-Culick et apparition du VSP*

De plus, de nombreux montages expérimentaux sur des écoulements dits en gaz froids [Ugurtas et al., 2000; Guéry et al., 2000; Anthoine, 2000] sont venus valider ce phénomène d'instabilité pariétale. La formation de tourbillons puis leur convection dans l'écoulement ont été visualisées par la méthode PLIF (pour Planar Laser Induced Fluorescence en anglais) sur le montage VECLA de l'ONERA [Avalon et al., 2000]. Dans ces travaux, une étude numérique a aussi été réalisée et a confirmé le nature instable de l'écoulement. Des résultats [Prévost et al., 2000b; Prévost et al., 2005] sur le montage en gaz chauds LP9, maquette simplifiée au 1/35ème du P230 où il est supposé n'y avoir aucun autre Vortex Shedding, assurent très clairement l'existence du VSP.

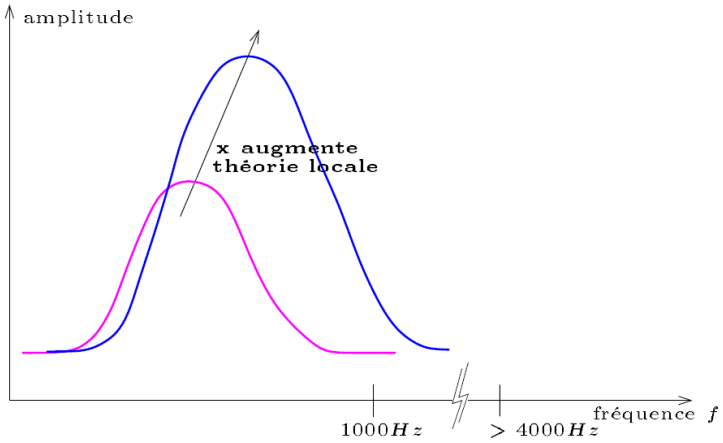


**FIGURE 1.13** – *Spectre typique du VSP et son évolution selon la coordonnée longitudinale, résultats obtenus sur les montages en gaz froids ©Thèse T. Ferraille*

### 1.2.3.2 Couplage aéroacoustique

Les trois mécanismes de Vortex Shedding sont bien à l'origine des instabilités de fonctionnement observés dans les grands MPS. Comme explicité dans [Vuillot and Casalis, 2000] et illustré en Fig.(1.14), c'est en réalité le couplage entre l'acoustique de la chambre et les structures tourbillonnaires qui vient renforcer le niveaux des instabilités. Les premières études et théories mettant en jeu ce phénomène d'excitation des modes acoustiques d'un MPS par un détachement tourbillonnaire ont été réalisées pour le cas du VSO [Flandro, 1973; Flandro, 1986].
Le phénomène de couplage aéroacoustique se décrit de la manière suivante : les structures tourbillonnaires apparaissent en différents points de la chambre, elles sont convectées par l'écoulement moyen pour finalement impacter la tuyère. Une onde acoustique est alors générée et remonte l'écou-

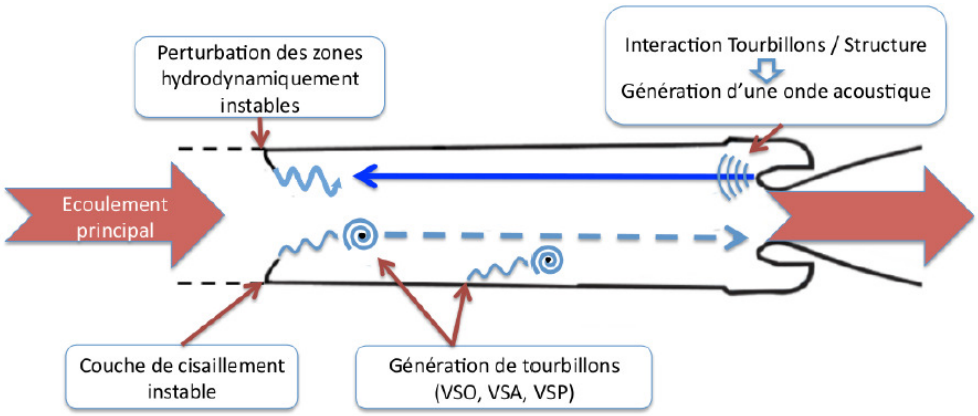


**FIGURE 1.14** – *Bouclage aeroacoustique au sein d'un MPS ©Thèse J. Richard*

lement. Cette perturbation acoustique peut favoriser le détachement tourbillonnaire (VSA et VSO) dans les zones hydrodynamiquement instables. Une boucle de résonance s'établit donc et l'écoulement devient instable. Plusieurs expériences sur des montages en gaz froids [Culick and Magiawala, 1979; Anthoine, 2000] ont souligné que l'amplitude des ODP était maximale quand la fréquence du détachement tourbillonnaire avoisine celle d'un mode acoustique : on parle alors d'accrochage acoustique. L'accord en fréquence du détachement tourbillonnaire et du mode acoustique de la chambre évolue au cours du temps car les conditions d'écoulement ainsi que la géométrie interne ne sont pas fixes. Il existe donc des moments privilégiés au cours du tir durant lesquelles les instabilités sont de fortes amplitudes, ce sont les bouffées observées par exemple pour le moteur P230 comme représenté dans la Fig.(1.9).

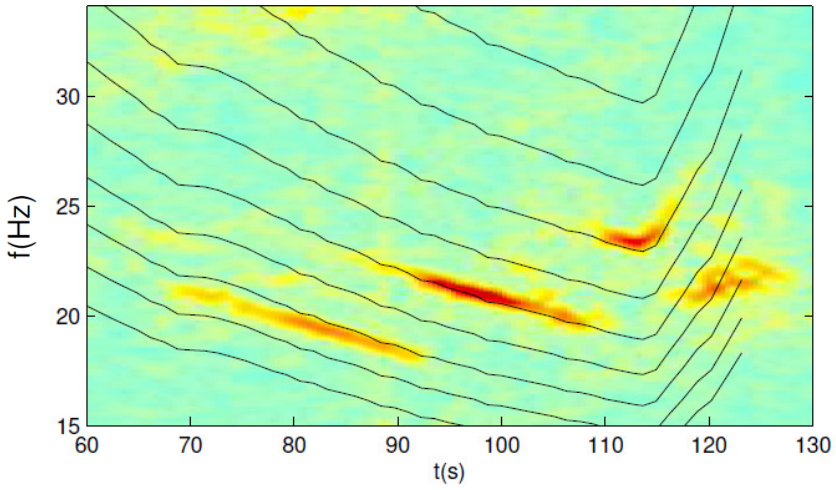


**FIGURE 1.15** – *Glissement en fréquence des ODP obtenue par analyse de l'accéléromètre de l'EAP1 du tir 510 d'Ariane 5 et réseau de modes propres de l'écoulement ©Thèse F. Chedevergne [Chedevergne, 2007]*

Dans le cas particulier du VSP, il a été mis en évidence [Chedevergne, 2007] que l'accrochage acoustique avait lieu lorsque le mode hydrodynamique de l'écoulement de type Taylor-Culick, aussi appelé mode propre, venait croiser la fréquence d'un mode acoustique. L'évolution temporelle de ce mode propre explique que la fréquence des instabilités soit modifiée au cours d'un tir. Au cours du tir, celle-ci s'éloigne suffisamment de la fréquence acoustique excitatrice ce qui explique le glissement en fréquence observé et sa décroissance comme illustré dans Fig.(1.15). Lorsque plusieurs sources de détachements tourbillonnaires se développent dans l'écoulement, il n'est pas nécessaire qu'elles excitent toutes un mode acoustique pour générer une instabilité globale. Cependant, il est possible que l'association de plusieurs sources tourbillonnaires calées sur la même fréquence se couplent et viennent renforcer l'accrochage acoustique et donc l'intensité des ODP.
Bien qu'il soit démontré que les Vortex Shedding sont à l'origine des instabilités de fonctionnement des grands moteurs à propergol solide, l'amplitude des ODP observées ne peut pas totalement s'expliquer par la présence de structures tourbillonnaires. Il existe d'autres phénomènes atténuateur ou amplificateur pouvant intéragir avec la structure hydrodynamique de l'écoulement et ainsi

modifier le couplage aéroacoustique. Deux exemples sont présentés dans le paragraphe suivant.

### 1.2.4 Quelques phénomènes interagissant avec les instabilités aéroacoustiques

#### 1.2.4.1 Rôle de la turbulence

La turbulence a démontré son effet atténuateur sur les ODP [Gallier et al., 2004] en désorganisant l'écoulement et en dissipant les structures hydrodynamiques. Il est donc essentiel d'établir avec précision la région de la chambre où la turbulence est pleinement développée. Des expériences en gaz chauds [Griffond, 2001] ont démontré l'existence d'une abscisse de transition $x_T$ au delà de laquelle l'écoulement est considéré turbulent. De récentes études [Apte and Yang, 2003] évaluent l'abscisse de transition laminaire/turbulent en fonction du rayon $R$ du canal et la fixent à $x_T \approx 20R$.

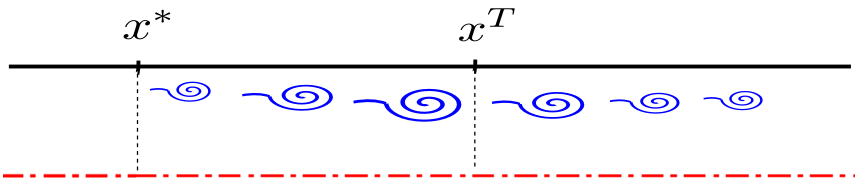


**FIGURE 1.16** – *Transition laminaire/turbulent et atténuation des structures tourbillonnaires*

L'apparition des mécanismes tourbillonnaires est d'autant plus retardée que la distance sur laquelle s'applique la turbulence est importante. Dans le cas de moteurs avec un rapport d'aspect $L/R$ élevé, la position $x_T$ se situe en amont de l'écoulement laissant pleinement agir la turbulence. Il n'est donc pas exclut que la turbulence joue un rôle prépondérant dans l'absence d'instabilités notables pour les longs moteurs segmentés d'Ariane 5 lors de la première phase du tir. La régression du propergol au cours du tir entraîne l'augmentation du rayon du canal $R$ déplaçant ainsi l'abscisse vers l'aval du moteur [Ballereau et al., 2011]. La distance sur laquelle les tourbillons sont dissipés étant réduite, les structures se développent et atteignent le col de tuyère avec une amplitude plus importante. Ainsi, c'est au cours de la seconde phase de fonctionnement des EAP que les ODP sont les plus marquées et que la turbulence est peu développée. De récents travaux [Gazanion et al., 2013] menés sur le montage en gaz froids VALDO, maquette représentative d'un MPS, ont démontré que la transition laminaire/turbulent ne dépend pas uniquement de la position longitudinale mais fait également intervenir la position radiale. Ainsi, la partie centrale de l'écoulement demeure laminaire sur une distance axiale plus longue que celle attendue par les précédentes études. Cette nouvelle donnée reste à vérifier sur des MPS en fonctionnement et à confirmer au travers de simulations numériques. La turbulence reste difficile à prévoir dans les MPS dans la mesure où celle-ci est en transition et est fortement impactée par le soufflage latéral qui donne une structure particulière à l'écoulement. Ce soufflage explique que l'on possède moins de connaissances que dans les études de couches limites sur les ailes d'avions par exemple.

#### 1.2.4.2 Interactions fluide-structure

La réponse de la structure peut impacter les niveaux d'ODP via deux phénomènes différents. Le premier concerne les interactions des modes acoustiques longitudinaux avec le corps du moteur. Comme illustré dans la Fig.(1.17), si le premier mode acoustique tend à déplacer le corps du moteur, le deuxième mode entraine principalement des variations de sa taille. Lors d'une étude menée sur le lanceur Titan IV [Dotson and Sako, 2004], il s'est avéré qu'en fonction du type d'attache moteur utilisé le couplage entre les déformations de la structure et les niveaux d'ODP était vérifié. Les interactions complexes entre les Vortex Shedding et les modes vibratoires de la structure du moteur ont été étudiées numériquement par [Masson et al., 2004] pour la navette spatiale.
Le second phénomène est le couplage entre les structures tourbillonnaires et les protections thermiques émergeantes dans l'écoulement au cours de la combustion du propergol. Il a été évoqué dans §1.2.3.1 que ces dernières étaient à l'origine du VSO des moteurs segmentés. On ajoutera aussi le fait que leur présence peut avoir une influence sur le développement de la turbulence. Un autre axe de recherche a récemment porté sur le couplage possible entre les déplacements des protections thermiques et les structures de l'écoulement. Etant constituées d'élastomère, elles sont donc flexibles et peuvent donc battre dans l'écoulement. Une étude de mécanique de la PT [Devesvre, 2011] est indispensable avant de rendre compte des couplages fluide-structure. Comme schématisé en Fig.(1.18), les travaux menés par J. Richard dans sa thèse [Richard, 2012] montrent que les

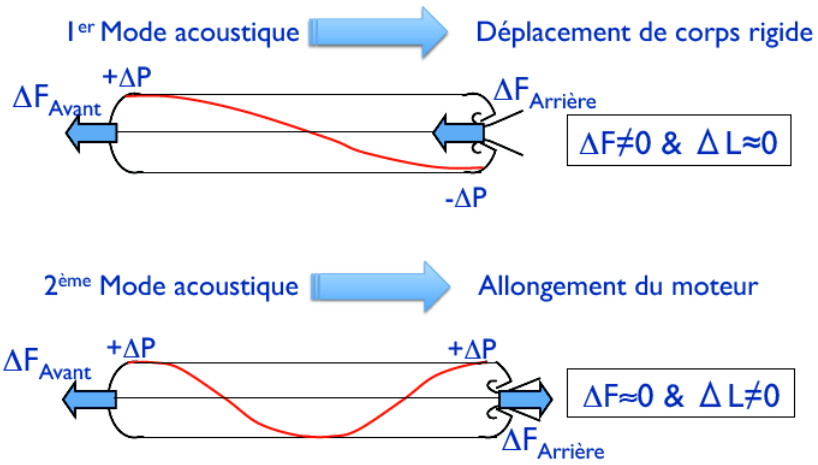


**FIGURE 1.17** – *Interactions corps du moteur / acoustique de la chambre* ©*Thèse J. Richard [Richard, 2012]*

battements de la PT entre les segments S2 et S3 du P230 peuvent assurer une plus grande structuration des détachements tourbillonnaires entraînant ainsi une augmentation des niveaux des ODP pour les trois premiers modes acoustiques mais comme précisé plus haut, la principale difficulté rencontrée dans ce type d'étude consiste à connaître la déformée exacte de la PT à l'instant du tir simulé. Les fluctuations de la PT ne sont pas bien connues d'autant qu'il est nécessaire d'étudier un comportement mécanique dynamique. L'étude de l'écoulement est finalement particulièrement complexe car les caractéristiques de la couche de cisaillement turbulente sont difficiles à apprécier.

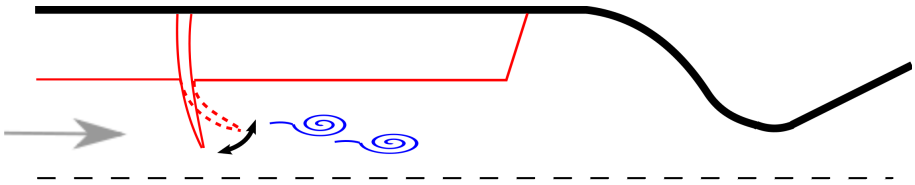

**FIGURE 1.18** – *Battement de la PT dans l'écoulement et génération de structures tourbillonnaires de type VSO*

## Conclusion du chapitre 1

Les nombreuses études, menées ces dernières décennies, ont conduit à améliorer significativement notre compréhension des instabilités de fonctionnement. De plus, les efforts de modélisation portant sur des écoulements instationnaires présentant un couplage entre des structures tourbillonnaires et l'acoustique sont notables. Les différentes études fournissent, pour les grands moteurs à propergol solide, des scénarios explicatifs des instabilités et des ordres de grandeur des amplitudes des ODP. La turbulence et les interactions fluide-structure tendent à agir sur ce couplage qu'elles viennent complexifier davantage avec pour conséquence une modification possible des niveaux d'instabilités et même des conditions d'accrochage. Ces deux derniers aspects ne sont pas développés dans cette thèse.

En revanche, nous nous intéressons plus particulièrement à l'influence de la combustion des gouttes d'aluminium et des résidus d'alumine sur l'écoulement gazeux et le couplage aéroacoustique. La présence de ces gouttes, aussi appelée phase dispersée ou condensée, joue un rôle déterminant dans la prévision des niveaux d'ODP comme cela est détaillé dans le chapitre suivant. Par la suite, nous évoquons les besoins de modélisation des gouttes en combustion et l'analyse des paramètres influents pour de futures simulations.

# Chapitre 2

# Enjeux et modélisation de la combustion des gouttes d'aluminium et impact sur les instabilités

*Dans ce chapitre, nous décrivons tout d'abord en détail la formation et les propriétés de la phase condensée au sein des moteurs à propergol solide. Nous identifions les phénomènes physiques en jeu et nous distinguons les mécanismes faisant l'objet d'un travail de modélisation de ceux vus comme des données d'entrée. Dans une seconde partie, nous illustrons au travers de plusieurs résultats issus d'études expérimentales, théoriques et numériques le rôle de la combustion des gouttes ainsi que des résidus inertes sur la stabilité du moteur. Aussi, nous discriminons les facteurs influents qui justifient un effort de modélisation particulier de la zone de combustion de la phase dispersée. Dans un troisième temps, nous présentons un état de l'art des modèles de combustion à l'échelle d'une goutte isolée d'aluminium. Puis, deux axes majeurs de développements sont alors proposés afin d'améliorer la représentativité des transferts de masse et d'énergie entre une goutte bicomposant et un milieu gazeux multiespèce. Finalement, nous détaillons les modèles de combustion utilisés par la suite et nous introduisons une nouvelle approche basée sur une description biespèce de la phase gazeuse.*

## 2.1 Formation et propriétés de la phase condensée

Dans l'environnement d'un MPS, la combustion des particules d'aluminium constitue une étape parmi plusieurs grands mécanismes propres à la physique des propergols aluminisés. On en dénombre quatre principaux :

1. Introduction de particules déjà oxydées dans le propergol
2. Agglomération et allumage à la surface
3. Combustion des gouttes en ambiance moteur
4. Production des résidus d'alumine et dispersion dans le moteur

### 2.1.1 Oxydation des gouttes avant incorporation dans le propergol

La fabrication des particules d'aluminium résulte de l'atomisation et du refroidissement de gouttes d'aluminium. Produites en atmosphère pauvre en $O_2$, les particules n'en demeurent pas moins très réactives et vont donc s'oxyder. Une fine couche d'alumine non poreuse se forme en surface. Précédemment estimée entre 5 et 10nm d'épaisseur [Duterque et al., 1999], elle a été réévaluée à 3nm dans de plus récentes études [Yetter et al., 2009]. Cette couche d'alumine agit comme une barrière et rend la particule inerte pour des conditions ambiantes. Cette épaisseur est la même quelle que soit la taille de la particule ce qui implique que l'alumine représente une faible fraction en masse pour des charges micrométriques. En revanche, pour des particules nanométriques, la proportion en alumine n'est plus négligeable comme le montre la Fig.(2.1) qui présente l'évolution de la fraction massique d'alumine en fonction de la taille de la particule. Aussi, il est naturel de se demander si les nouvelles poudres composées de nano-particules [Maggi et al., 2013] sont intéressantes à tous points de vue. L'alumine inerte ne participe pas à l'apport énergétique ; une partie de la masse de l'additif métallique est donc perdue.

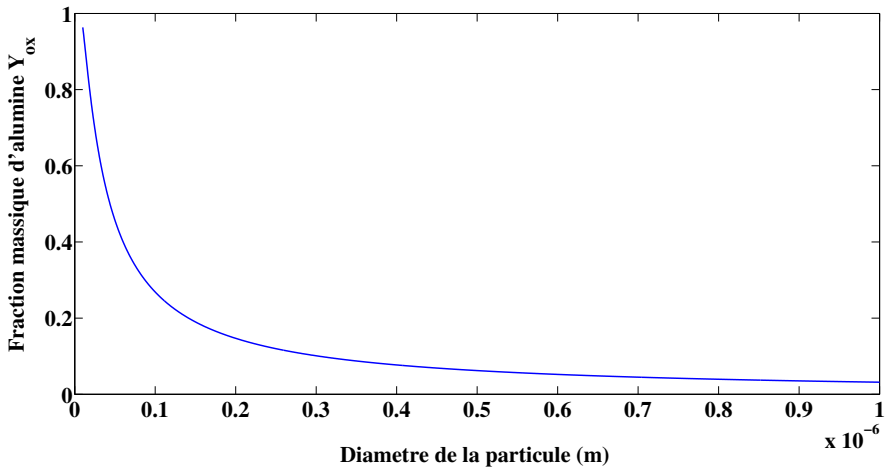


**FIGURE 2.1** – *Evolution de la fraction massique d'alumine $Y_{ox}$ pour une particule présentant une couche d'alumine de 3nm (Données du calcul : $\rho_{al} = 1500kg/m^3$ et $\rho_{ox} = 2700kg/m^3$ )*

Les récentes études sont plus spécifiquement consacrées à l'étude du processus d'oxydation et surtout aux moyens de le réduire [Litrico et al., 2013]. Il est par exemple suggéré d'enrober les particules de polymères pour assurer une passivation de ces dernières ; ces travaux ont été présentés pour des nano-particules dans [Ait Atmane, 2012].
Les particules sont dispersées et mélangées dans la pâte lors de la fabrication du propergol. Comme évoqué dans §1.1.2.1, les charges métalliques ont tendance à se rassembler dans des poches [Cohen, 1983], zones laissées libres entre les gros grains de PA. Pour la Butalane du moteur P230, la distribution en taille des particules métalliques est monomodale avec un diamètre médian en masse avoisinant 30$\mu$m alors que la taille des gros grains de PA avoisine les 200$\mu$m. Les poches sont donc constituées des particules d'aluminium et des plus petits grains de PA, le tout noyé dans le liant.

### 2.1.2 Agglomération des particules à la surface puis allumage

Conséquence de la combustion du propergol, la température à la surface du propergol s'élève à une température proche de celle de la flamme de prémélange du PA, c'est-à-dire environ 1400K dans les conditions de pression régnant dans le P230. Les particules métalliques les plus proches de la surface s'échauffent et leur coeur d'aluminium devient liquide une fois la température de fusion de 933K atteinte. Celle de l'alumine étant d'environ 2327K [Dupays, 2009], la couche protectrice demeure donc solide. Les particules ne brûlent donc pas directement à la surface du propergol. Néanmoins, la dilatation de l'aluminium, dont le coefficient thermique est sept fois supérieur à celui de l'alumine, fissure la couche d'oxyde solide [Rosenband, 2004] et expose le métal liquide à l'oxygène produit par la décomposition du PA.
Au même moment, une partie des particules voisines au sein des poches s'agglutinent pour former un agrégat. Ce phénomène d'agglomération est particulièrement difficile à apprécier. En effet, les conditions d'observation au sein d'un MPS sont particulièrement contraignantes. Le processus de formation des agrégats proposé dans [Price and Sigman, 2000] est le suivant : les particules adhèrent à la couche fondue du liant qui les entoure, elles tendent à se maintenir entre elles du fait de la présence d'une surface carbonée puis elles adhèrent définitivement pour former un agrégat. On sait maintenant que le processus d'agglomération a lieu quand les particules se situent entre la surface du propergol et la flamme de diffusion du PA.
Alors qu'à pression atmosphérique standard, la majeure partie se regroupe en agrégats [Parr and Hanson-Parr, 2006], seulement un tiers des particules forme un agrégat quand la pression est de 50bar pour une Butalane type Ariane 5 [Duterque et al., 1999]. Cette sensibilité à la pression est à relier à l'épaisseur de la zone de flamme du propergol. En effet, la production des agglomérats est conditionnée par le temps passé par les particules dans cette zone. Il a été montré [Bellec et al., 1997] que son épaisseur est inversement proportionnelle à la vitesse de régression du propergol, fonction de la pression de la chambre comme indiqué au §1.1.2.2. Si la pression est basse, la hauteur de flamme du PA est importante et les particules ont le temps de s'agglomérer. Si la pression est importante, la hauteur de flamme diminue. Associée à ce phénomène, la vitesse des gaz produits est plus forte, les particules sont entraînées plus rapidement dans l'écoulement ce qui leur offre un temps d'agglomération plus court avant d'atteindre la flamme de diffusion du PA.

Pour le moteur P230 dont la pression est proche de 50bar, la granulométrie après agglomération est donc bimodale constituée au 2/3 en masse de particules isolées, le reste étant les agglomérats que l'on appelle aussi globules. La réduction de la quantité d'agglomérats et de leur taille peut être envisagée en jouant sur la répartition granulométrique du PA afin de réduire la taille des poches ou en utilisant des additifs spécifiques pour modifier la structure de flamme. Aujourd'hui, la caractérisation de la phase condensée quittant la surface est encore largement déterminée de manière expérimentale en utilisant des techniques de captation ou de visualisation non intrusive sur des montages dédiés. En complément, on assiste à l'essor d'études numériques qui portent par exemple sur la nature hétérogène du propergol, modélisée en utilisant une méthode dite de packing [Maggi et al., 2008] comme illustré en Fig.(2.2). Les propriétés thermomécaniques du matériau [Gallier, 2011; Davidenko and Fabignon, 2013] et la distribution en taille des particules quittant la surface [Maggi et al., ] sont les objectifs principaux de ces recherches.

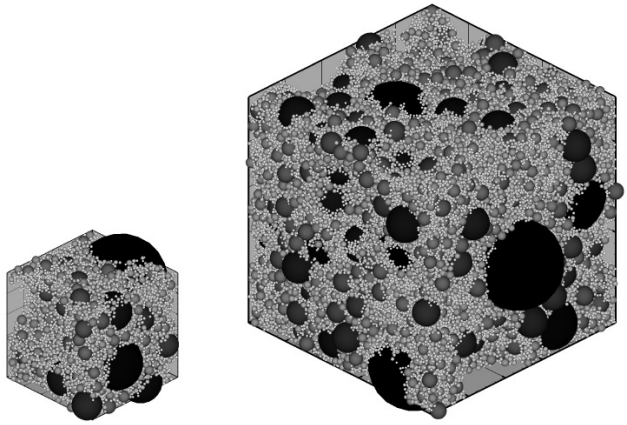

**Figure 2.2** – *Illustration de la technique de packing prenant en compte la structure hétérogène du propergol ©[Davidenko and Fabignon, 2013]*

Que ce soit pour les agrégats ou pour les particules isolées, l'aluminium liquide mis à nu après fissuration de la pellicule d'alumine va s'oxyder très rapidement pour reformer de l'alumine. On parle alors d'oxydation hétérogène en surface [Merzhanov, 1975; Bucher et al., 1999]. Cette réaction est très exothermique et participe à l'élévation de température de la particule et au processus d'allumage. Le mécanisme d'oxydation s'entretient car la dilatation de l'aluminium au sein de la particule se poursuit au cours de la montée en température.
La température d'allumage est une donnée qu'il est très difficile d'estimer car elle dépend de la température ambiante et de la composition des oxydants qui entourent la goutte. Sa valeur est donc comprise entre la température de fusion de l'aluminium et celle de l'alumine.
Finalement, quand la température de fusion de l'alumine est atteinte, la couche d'oxyde se liquéfie, se rétracte, laissant apparaître en grande partie l'aluminium de la goutte. L'allumage de la goutte est donc complet et la combustion va s'initier. Néanmoins, le mécanisme réactionnel d'oxydation est d'autant plus long que la taille de la goutte est grande. Ainsi, les particules isolées s'allument plus près de la surface que les agglomérats.
L'aluminium et l'alumine ne sont pas miscibles et une étude de stabilité mécanique [Kuentzmann, 1973a; Meinkohn, 2000], prenant en compte les forces de tension superficielle, montre une rétraction de l'oxyde sous la forme d'un lobe dont la géométrie peut être schématisée en Fig.(2.3). La forme de la goutte n'en demeure pas moins globalement sphérique. Notons aussi que la masse du lobe d'un globule est proportionnellement plus importante que celle d'une goutte isolée dont le temps de séjour à la surface du propergol est plus réduit.

### 2.1.3 Combustion en ambiance gaz de propergol

L'aluminium, en contact avec les gaz oxydants de l'environnement moteur, s'évapore et brûle suivant un mécanisme de flamme de diffusion (essentiellement valable pour des gouttes micrométriques). Cette dernière s'établit à une certaine distance de la goutte, estimée par exemple à trois fois le rayon de la goutte dans les études menées dans [Wilson and Williams, 1971]. Mais cette distance est très dépendante des conditions régnant autour de la goutte. En dehors de l'espèce $O_2$, l'analyse des produits de combustion d'un propergol aluminisé montre que les espèces $CO_2$ et $H_2O$ sont les principaux oxydants impliqués dans la combustion [Belyaev et al., 1968].
Au niveau de la flamme, la réaction génère des gouttelettes d'alumine de taille submicronique

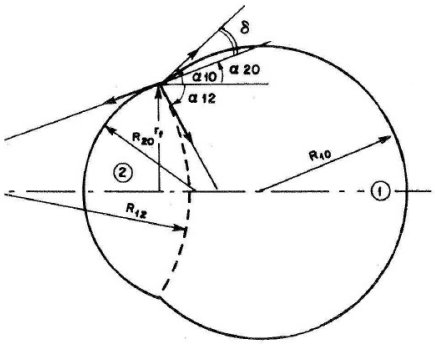


**FIGURE 2.3** – *Répresentation du lobe d'alumine selon Kuentzmann [Kuentzmann, 1973a]*

appelées fumées et un ensemble d'espèces gazeuses, les sous-oxydes d'aluminium tels que $AlO$, $AlO_2$ et $Al_2O$. Les différents échanges de masse entre la goutte et le milieu environnant peuvent être schématisés par la Fig.(2.4). Les réactions en phase gazeuse sont en réalité bien plus complexes et mettent en jeu un nombre important d'espèces. Dans [Swihart and Catoire, 2000], 33 espèces et 89 réactions sont par exemple recensées.

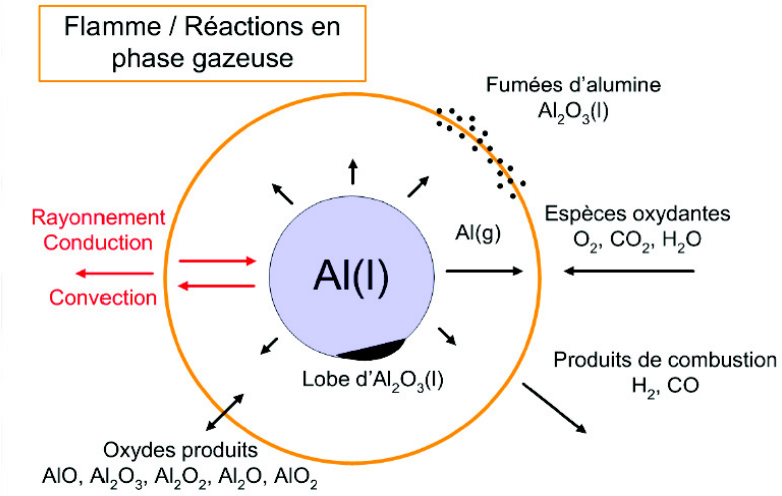


**FIGURE 2.4** – *Schématisation des échanges de masse lors de la combustion d'une goutte micrométrique d'aluminium [Melcher et al., 2000; Chassagne, 2007]*

Les fines gouttelettes d'alumine sont produites par condensation des sous-oxydes d'aluminium. Le débat est ouvert pour savoir si l'alumine existe en phase vapeur dans ces conditions de fonctionnement. Le mécanisme de condensation dégage une énergie suffisante pour entretenir l'évaporation de l'aluminium. Les fumées d'alumine sont par la suite convectées par l'écoulement autour de la goutte pour former un panache comme illustré en Fig.(2.5).
Il n'est pas impossible qu'une partie des sous-oxydes d'aluminium rétrodiffusent vers la goutte, se condensent à la surface et viennent grossir le lobe d'alumine. La croissance de ce dernier a été observée dans un mélange riche en oxygène [Wilson and Williams, 1971; Dreizin, 1999] mais n'a pas été démontrée au sein de la chambre d'un MPS. En effet, si la combustion de gouttes d'aluminium est assez bien maîtrisée dans un environnement contrôlé, composé d'oxygène et de gaz inertes comme l'azote, le processus n'est pas aussi simple au sein du moteur où la composition gazeuse est particulièrement complexe et évolue rapidement dans la zone proche de la surface du propergol. Plusieurs études portant sur la combustion en ambiance gaz de propergol [Melcher et al., 2000] ont été menées, en utilisant notamment un propergol proche de la Butalane du P230 [Trubert, 2000]. Ces recherches portent essentiellement sur la détermination des temps de combustion et de la granulométrie des résidus en conditions représentatives.
En dehors des fines gouttelettes d'alumine proches de $1\mu$m, des résidus d'alumine plus gros sont observés en fin de combustion. Ces derniers proviennent des lobes des gouttes d'aluminium. Comme illustré dans la Fig.(2.6), ces oxydes résiduels ont une granulométrie typiquement bimodale [Duterque et al., 1999] pour le cas du P230 avec une taille proche de $3\mu$m pour ceux issus des gouttes isolées et une taille avoisinant les $60\mu$m pour les agglomérats.

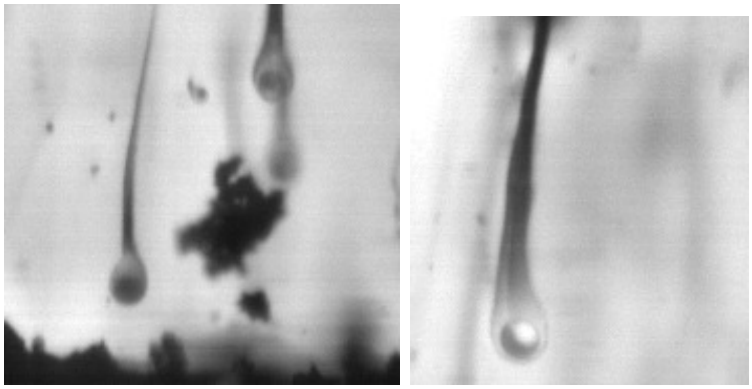

**Figure 2.5** – *Particules isolées et agglomérats quittant la surface du propergol (à gauche) et combustion d'une goutte isolée (à droite) et son panache de fumées, la partie la plus claire de la goutte correspond au lobe d'alumine. Visualisation par strioscopie ©ONERA DEFA/Devillers 2013*

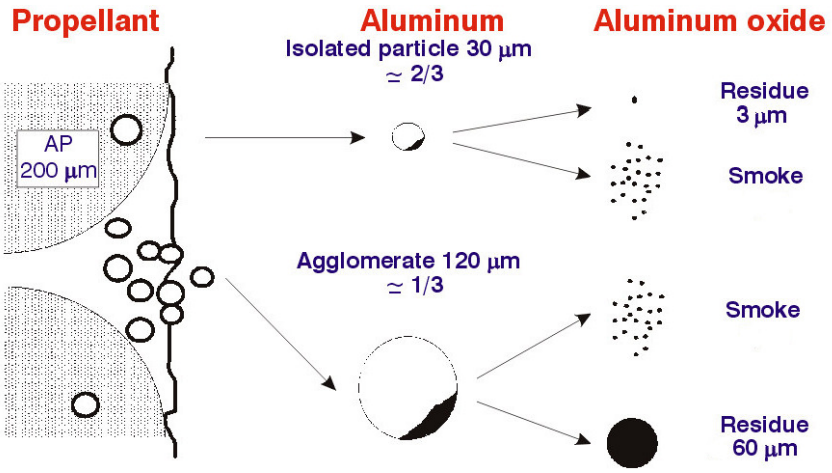


**Figure 2.6** – *Formation et caractéristiques de la phase condensée dans le cas de la Butalane du P230 [Fabignon et al., 2003b]*

En fin de combustion, une fragmentation des gouttes, liée à la dissolution d'oxygène en leur sein, est parfois observée. Ces études ont été faites dans des atmosphères maîtrisées (riche en oxygène [Brulard, 1967] ou en présence de vapeur d'eau [Prentice, 1970]) et ne reflètent pas exactement ce qui se passe en ambiance moteur. Ce phénomène ne sera pas pris en compte dans le cadre de cette thèse.
La présence d'un lobe et la possibilité que celui-ci grossisse au cours de la combustion sont deux paramètres importants pour établir une modélisation représentative de la combustion. En effet, l'oxyde de la goutte occulte une partie de la surface ce qui limite les échanges de masse avec le milieu gazeux. La dynamique de combustion s'en trouve donc changée. De plus, ce point ne doit pas être écarté car il impacte la distribution en taille des gouttes et des résidus. Ainsi, nous cherchons à nous doter des outils nécessaires à la description de gouttes bicomposants ainsi que des modèles de transferts de masse appropriés.

### 2.1.4 Production des fumées et des résidus d'alumine et dispersion dans l'ensemble du moteur

Les gouttelettes submicroniques produites au niveau de la flamme de diffusion peuvent grossir par coalescence [Karasev et al., 2006]. Plus la concentration de ces fumées est importante, plus elles tendent à s'agglutiner pour former des gouttes de l'ordre de quelques micromètres. La taille initiale de la goutte d'aluminium joue un rôle important : plus celle-ci est importante, plus la quantité de nano-gouttes générées est importante ce qui favorise leur coalescence [Glotov et al., 2007]. Ces nouvelles gouttes associées aux résidus d'alumine provenant des lobes constituent donc la distribution en taille des particules obtenue en fin de combustion.
Après combustion, la température du résidu s'élève pour atteindre celle du gaz beaucoup plus chaud, de l'ordre de 3400K par exemple dans le cas du P230. Les particules restent liquides lors

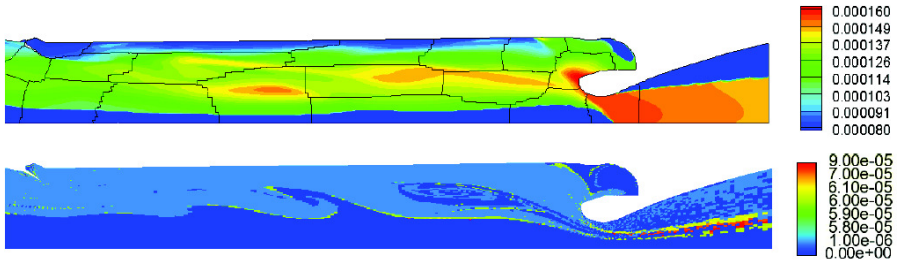


**FIGURE 2.7** – *Illustration de la coalescence de gouttes d'alumine dans le moteur P230 par simulations numériques [Doisneau, 2013]*

de leur séjour dans la chambre du moteur. Le résidu d'alumine tend aussi à se mettre en équilibre dynamique avec le gaz qui accélère progressivement au sein du moteur. Selon leur taille, les gouttes ne suivent pas instantanément les fluctuations de vitesse de l'écoulement. Les plus petites sont peu inertielles et sont considérées comme des traceurs dans l'écoulement. Dans cette catégorie, on retrouve les fumées d'alumine et les plus petits résidus qui peuvent se disperser dans l'ensemble du moteur. Les gouttes de taille plus importante ont ainsi un comportement différent puisqu'elles ont des trajectoires préférentielles. Ainsi pour certains moteurs, par exemple ceux qui ont une tuyère intégrée, elles alimentent la flaque d'alumine du fond arrière du moteur [Godfroy and Guéry, 1997; Dupays et al., 2000]. Les résidus inertiels connaissent également des phénomènes de collision et de coalescence [Doisneau, 2013] comme illustré par des simulations numériques récentes dont un exemple de résultats est donné en Fig.(2.7). Enfin, leur passage dans la tuyère, où elles tendent à se fragmenter, modifie significativement la granulométrie [Hermsen, 1981b; Kovalev, 2002b].

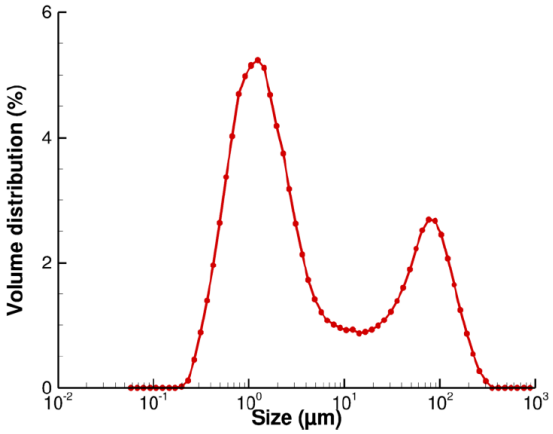


**FIGURE 2.8** – *Exemple d'une distribution en taille bimodale pour des résidus d'alumine collectés sur le montage "Quench Bomb" [Gallier et al., 2013]*

Ces interactions gouttes-gouttes modifient alors la granulométrie des résidus de fin de combustion. Il n'est donc pas évident de connaître la distribution de taille en fin de combustion à partir d'une information obtenue en sortie du moteur d'où l'importance des montages expérimentaux dédiés à la caractérisation de la phase condensée après combustion. Des travaux de ce type ont été effectués sur le montage "Quench Bomb" [Salita, 1994] avec notamment le propergol de la navette spatiale. Ils ont également été entrepris par SNPE pour plusieurs compositions de Butalane type Ariane 5 [Ruiz and Kratz, 1996] présentant différentes granulométries de particules d'aluminium sur un montage similaire appelé piège rotatif. La Fig.(2.8) illustre parfaitement la distribution en volume bimodale obtenue après combustion d'une composition Butalane. Ce résultat est issu de mesures [Gallier et al., 2013] réalisées sur un propergol contenant des particules d'aluminium de $40\mu m$ de diamètre.
L'évolution entre la granulométrie initiale des particules d'aluminium introduites dans le propergol et celle des résidus en sortie moteur ainsi que les modifications de la composition des gouttes peuvent être résumées en dressant le tableau récapitulatif fourni en Tab.(2.1).

**TABLE 2.1** – *Résumé de l'évolution de la composition et de la granulométrie des gouttes au sein d'un MPS*

| Mécanisme physique | Composition goutte | Evolution granulométrie (P230) |
|---|---|---|
| Oxydation/Fabrication | Source mineure d'$Al_2O_3$ | Monomodale |
| Agglomération à la surface | Aucune source mais évolue par fusion | Important -> Bimodale |
| Oxydation hétérogène en surface | Source majeure d'$Al_2O_3$ | Reste Bimodale |
| Evaporation Combustion en phase gazeuse | Perte majeure d'$Al$ | Déplacement des modes |
| Rétrodiffusion possible d'oxydes d'aluminium | Source d'$Al_2O_3$ Non confirmée | Déplacement des modes |
| Coalescence des résidus | Aucun changement | Important -> Multi-modale |
| Fragmentation dans la tuyère | Aucun changement | Important -> Multi-modale |

### 2.1.5 Position des travaux de thèse par rapport à la vie des gouttes d'$Al/Al_2O_3$

La Fig.(2.9) retrace la vie d'une goutte d'aluminium au sein du moteur et les différentes phénomènes rencontrés. Les points faisant l'objet de modélisations et d'études au cours de cette thèse sont mis en lumière :

- L'agglomération des particules, l'oxydation hétérogène en surface et l'allumage sont des données d'entrée -> La distribution en taille des gouttes juste avant combustion est supposée connue.

- La combustion en phase gazeuse décrite par une flamme de diffusion est l'objet d'un effort de modélisation -> Développement de modèles de combustion spécifiques décrivant des gouttes bi-composants.

- La distribution en taille de la granulométrie initiale et celle des résidus est prise en compte et les interactions avec l'écoulement et entre gouttes sont étudiées -> Développement de méthodes numériques pour la simulation des écoulements diphasiques réactifs polydisperses.

Chaque étape correspond à un changement d'état thermodynamique et de composition pour le gaz. Ces grandeurs caractéristiques sont pour la plupart difficiles à estimer car délicates à observer en conditions de fonctionnement. La zone proche de la surface du propergol où se positionne la flamme de diffusion du PA et au niveau de laquelle la majeure partie des agglomérats se sont formés n'est pas étudiée dans cette thèse. Son étendue est supposée suffisamment faible pour ne pas être prise en compte en première approche dans un calcul de balistique interne. Il est néanmoins crucial de connaître avec un maximum de précisions la distribution en taille des gouttes d'$Al/Al_2O_3$, la température et la composition du gaz avant la combustion des gouttes. Il s'agit donc d'un travail sur les données d'entrée qui recoupe des observations expérimentales et des hypothèses sur la physique des particules d'aluminium en ambiance moteur. Le travail de modélisation de cette thèse se focalise sur la représentativité de la combustion des gouttes bicomposants et son impact sur l'hydrodynamique et l'acoustique. Une attention particulière est également portée sur les résidus d'alumine et les possibles interactions gouttes-gouttes telles que la coalescence et la fragmentation.

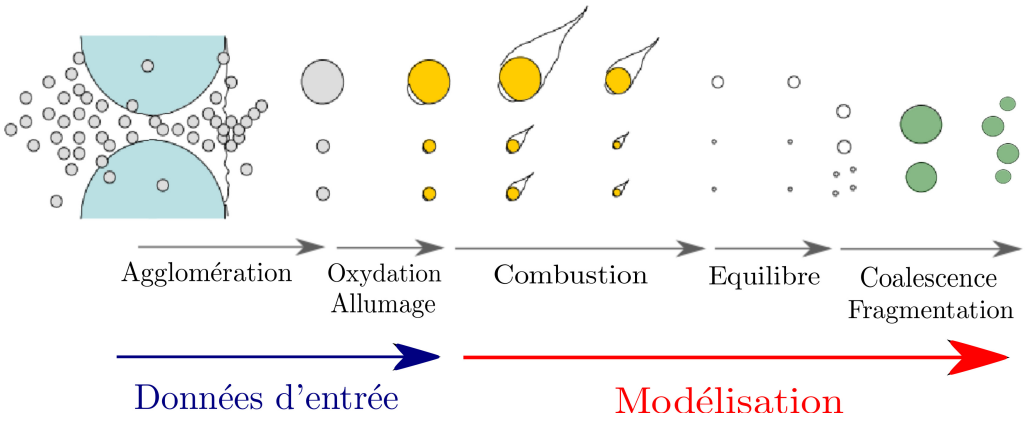


**FIGURE 2.9** – *Vie d'une particule d'aluminium* ©*ONERA DEFA/Dupays*

Il est important de noter qu'au cours de la combustion nous excluons toutes possibilités d'interactions entre gouttes ce qui permet de se focaliser uniquement sur la physique d'une goutte isolée. Cette hypothèse n'est pas absurde puisque très peu de collisions sont observées dans la zone de combustion. En effet, entraînées par le gaz, les gouttes se croisent rarement et le dégagement de masse dû à la combustion tend à maintenir les autres gouttes à distance ; la combustion dite de groupe n'est absolument pas considérée ici.
Avant d'aborder des aspects de modélisation, il est nécessaire d'illustrer l'importance de la prise en compte de la combustion des gouttes et plus globalement d'un brouillard de gouttes sur l'écoulement interne d'un MPS. Nous relevons ainsi dans la partie suivante plusieurs configurations où l'enjeu de l'étude d'un spray réactif est avéré. Les grandeurs caractéristiques clés sont aussi soulignées.

## 2.2 Rôle de la combustion distribuée sur les instabilités et enjeu d'un modèle de combustion représentatif

Contrairement à la combustion des grains de PA et du liant qui a lieu en surface immédiate du propergol, celle des gouttes d'aluminium se répartit dans un volume de la chambre relativement localisé, caractérisée par une épaisseur de combustion. On parle alors de combustion distribuée des particules d'aluminium [Beckstead, 1987; Beckstead and Brooks, 1993]. En 1969, Summerfield et Krier [Summerfield and Krier, 1969] prônait le rôle atténuateur des particules d'aluminium sur les instabilités moteurs. Un potentiel bénéfique que Price [Price, 1971] a par la suite tempéré après analyse d'un grand nombre d'essais réalisés dans les années 60.
Bien qu'à ce jour, l'influence de la combustion distribuée n'ait pas été directement observée dans les conditions de tir, plusieurs études numériques ont cependant mis en évidence que, sous certaines conditions, les transferts de masse et d'énergie pouvaient impacter les niveaux d'instabilités des MPS. Deux phénomènes ont été identifiés :

– Une modification des structures hydrodynamiques et donc de la dynamique du couplage aéroacoustique.

– Un couplage de nature thermoacoustique, appelé ITHAC, conduisant à une instabilité de fonctionnement.

Le premier phénomène ne met pas en évidence la combustion des particules en tant que source des instabilités mais plutôt comme un mécanisme amplificateur ou atténuateur d'instabilités existantes d'origine aéroacoustique alors que, dans le second cas, la contribution des gouttes est directement à l'origine d'une instabilité ITHAC.
La mise en évidence de la contribution de la combustion des gouttes d'aluminium sur les instabilités doit être faite idéalement en écartant l'impact des résidus sur l'écoulement. Pour certaines configurations moteurs, différentes concentrations et distributions en taille de particules inertes ont montré un effet amplificateur des ODP alors que pour d'autres l'effet inverse était observé. Ce point est développé dans §2.2.1.1.
Les résultats et les observations présentés dans les paragraphes suivants sont issus de montages expérimentaux, de développements analytiques et de simulations numériques. Pour ces dernières, il n'est pas donné, dans cette partie, de précisions sur les méthodes de résolution ou les modèles employés. L'objectif est de mettre en valeur l'apport de l'approche numérique en complément des expériences et faire ressortir les paramètres influents liés à la présence de gouttes d'$Al/Al_2O_3$ en combustion sur l'écoulement interne d'un MPS.

### 2.2.1 Effets des résidus et de la combustion distribuée sur l'aéroacoustique de la chambre

#### 2.2.1.1 Impact des particules inertes sur l'écoulement interne d'un moteur

En conditions moteur, il est assez difficile de discriminer la contribution de la combustion distribuée de celle des résidus inertes d'alumine. Ainsi, des montages expérimentaux tels que le C1xb [Dupays, 1996; Dupays et al., 1996] ont été mis en place et ont permis d'étudier le comportement de particules inertes dans un moteur sujet à du Vortex Shedding. Dans le cas du C1xb, il s'agit plus spécifiquement de VSA. Plusieurs propergols ont été utilisés pour les essais : Butalite (aucune charge métallique), Butalamine (contenant des particules d'alumine de petite taille, environ $5\mu m$) et Butalazine contenant des particules de silicate de zirconium de plus grande taille, $50\mu m$. L'instabilité hydrodynamique a été réduite par l'ajout des particules inertes. La concentration massique en particules incorporée dans la Butalamine est apparue comme un paramètre influent car elle joue sur le mécanisme d'atténuation. Les essais effectuées avec 5% et 10% en masse de particules d'alumine démontrent un amortissement important par rapport à l'essai de référence en Butalite. Néanmoins, la sur-atténuation attendue avec une masse deux fois plus importante de particules n'a pas été observée ce qui est remarquable et démontre la complexité de la prise en compte de la phase condensée inerte.
La taille des particules est aussi déterminante. Les résultats obtenus avec des particules de $5\mu m$ diffèrent significativement de ceux obtenus pour $50\mu m$. Dans ce dernier cas, l'atténuation est très faible. Les niveaux sont semblables à ceux observés dans le cas de la Butalite. La répartition des modes acoustiques excités change aussi. Ainsi les modes 2L et 3L sont plus marqués que le 1L. Une étude d'acoustique linéaire diphasique, proposée par Temkin et Dobbins [Temkin and Dobbins,

1966], suggère que le maximum d'atténuation est obtenu avec des particules dont le nombre de Stokes acoustique $St$ est proche de 1. Le nombre de Stokes est le ratio entre le temps de réponse dynamique de la particule et celui de la fluctuation acoustique du milieu. Ce type d'étude est plus détaillé dans §2.2.1.2 pour des gouttes en évaporation.
Par la suite, des études numériques ont été conduites sur une configuration moteur tirée du tir LP6 n°7. Ce moteur est une maquette à l'échelle 1/15ème du P230. Cet essai a été réalisé avec une Butalite et s'est intéressé au développement d'un Vortex Shedding Pariétal. Les simulations numériques ont alors consisté en des calculs avec injection pariétale de particules d'alumine de différentes tailles et pour différentes concentrations. Les résultats ont été surprenants puisque l'instabilité VSP a été systématiquement amplifiée. Ce comportement est différent de celui observé pour le cas C1xb. De plus, l'amplification est d'autant plus importante que la concentration en particules est forte. L'augmentation des ODP est maximale pour des tailles de particules avec un Stokes proche de 1 ce qui est en désaccord avec l'étude d'acoustique linéaire prévoyant une atténuation optimale pour cette valeur et confirmé pour le montage C1xb. Le scénario explicatif proposé par SNPE [Ballereau et al., 2003] est le suivant : il y a centrifugation des particules par les structures tourbillonnaires et donc formation de paquets de particules entre les tourbillons puis passage des particules par le col sonique et remontée d'une perturbation acoustique augmentant les niveaux de l'instabilité.

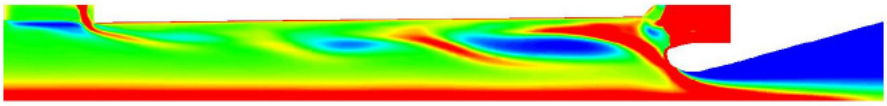

**FIGURE 2.10** – *Illustration de la centrifugation des particules par les structures tourbillonnaires du VSP pour le montage LP10 ; visualisation de leur concentration massique*

L'amplification systématique avec des particules inertes observée numériquement a conduit à proposer une campagne de validation numérique/expérimentale sur la configuration LP10, qui est une maquette simplifiée à l'échelle 1/35ème du P230, en s'appuyant sur le tir de référence n°17 réalisé avec de la Butalite et qui présente du VSP. Il a été proposé de réaliser un nouveau tir en introduisant dans le propergol des particules inertes de $ZrO_2$ (zircone) dont les propriétés thermophysiques sont connues et la granulométrie parfaitement fixée car ces particules restent solides dans l'écoulement aux températures rencontrées. Les résultats des simulations ont été confirmées par les essais et par de nouvelles simulations menées sur la configuration LP10 [Dupays et al., 2008]. Dans les deux approches, les niveaux sont bien amplifiés, à certains moments du tir, par la présence des particules de zircone. Néanmoins, des différences sont apparues entre la simulation et l'expérience tant sur les niveaux des ODP que sur les fréquences. Une connaissance imparfaite de la géométrie de la chambre et des conditions d'injection de l'instant du tir qui est choisi pour les simulations est une source d'écart possible entre les résultats numériques et les relevés expérimentaux. Il est à souligner que l'interaction entre le gaz et les gouttes, particulièrement importante quand la concentration massique augmente comme détaillé dans §3.1.2.3, doit être parfaitement abordée d'un point de vue numérique. Ce point est un objectif majeur de cette thèse comme présenté dans §7.1.
L'étude de stabilité linéaire proposée par Feraille [Feraille, 2004] pour un écoulement avec injection pariétale a mis en évidence le fait que la présence de particules inertes avait un potentiel amplificateur ou atténuateur des instabilités aéroacoustiques. Il n'est cependant pas clairement identifié si c'est la nature du Vortex Shedding, VSA pour le C1xb et VSP pour les LP6 et LP10, ou bien l'absence de la cavité du fond arrière, pour le C1xb, qui détermine le rôle amplificateur ou amortisseur des particules sur les ODP.

#### 2.2.1.2 Influence des particules réactives sur la propagation d'une onde acoustique plane : Conséquence des transferts de masse

En s'inspirant des travaux de Temkin et Dobbins [Temkin and Dobbins, 1966] portant sur la propagation d'une onde acoustique plane dans un milieu homogène gaz+gouttes inertes au repos et en équilibre thermique, une étude plus complète a été proposée pour analyser l'effet des transferts de masse. Quand les gouttes s'évaporent dans leur propre vapeur selon une dynamique pilotée par la conductivité thermique [Dupays and Vuillot, 2002], l'onde acoustique est soit amortie soit amplifiée (cf. la Fig.(2.11)). Ce comportement est sensible à la valeur de la chaleur latente de vaporisation du liquide. Ce cas d'étude d'acoustique linéaire est très spécifique car les fluctuations de température autour de la valeur d'équilibre conduisent à une alternance de régimes d'évaporation et de condensation.

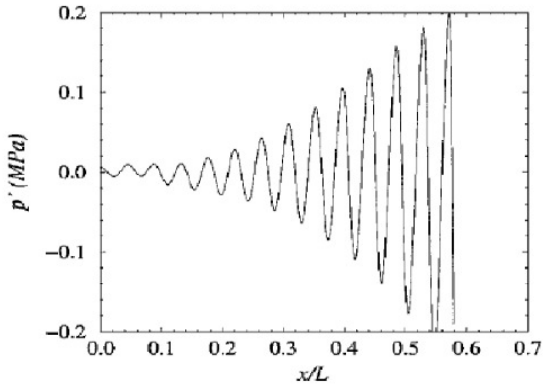


**FIGURE 2.11** – *Illustration d'une onde acoustique amplifiée dans un milieu gaz-gouttes (de 6µm caractérisées par un nombre de Stokes de 0.25) avec une évaporation pilotée par la diffusion thermique [Dupays and Vuillot, 2002]*

Cette étude a été étendue [Dupays, 2002a] pour un mécanisme d'évaporation différent, cette fois-ci en considérant un gaz multiespèce et un transfert de masse contrôlée par la diffusion. Comme illustré en Fig.(2.12), l'onde acoustique est amplifiée uniquement si l'équilibre thermique est rompu. Dans ce cas, la température du gaz est supérieure à celle des gouttes, il n'y a pas d'alternance de régimes évaporant/condensant autour d'un état d'équilibre. Il s'agit d'une situation où l'évaporation est continûment maintenue. Cette étude est donc plus proche d'un cas de combustion même si elle présente de nombreuses limites telles que l'absence d'une source de chaleur de réaction.
Au cours de ces études, la taille des gouttes est systématiquement ressortie comme un paramètre important, comme cela avait été remarqué dans le cas inerte. En effet, en fonction de la fréquence de l'onde acoustique, il existe une taille préférentielle pour laquelle l'amplification ou l'atténuation spatiale, noté $\alpha^*$, est maximale. Cette valeur est obtenue quand le nombre de Stokes de la goutte est proche de 1. Ce dernier est défini ici par : $St = \omega\tau_u$ où $\omega$ est la pulsation de la perturbation acoustique et $\tau_u$ est le temps de réponse dynamique de la goutte. Ce temps caractéristique est proportionnel au carré du diamètre de la particule comme détaillé dans §3.4.1.1. Quand $St << 1$, les gouttes suivent très rapidement les fluctuations acoustiques alors que pour $St >> 1$ elles sont très peu sensibles à ces perturbations. La dispersion de l'onde acoustique, notée $\beta^*$, qui caractérise la vitesse du son du milieu, connait de plus fortes variations quand le nombre de Stokes se rapproche de 1.

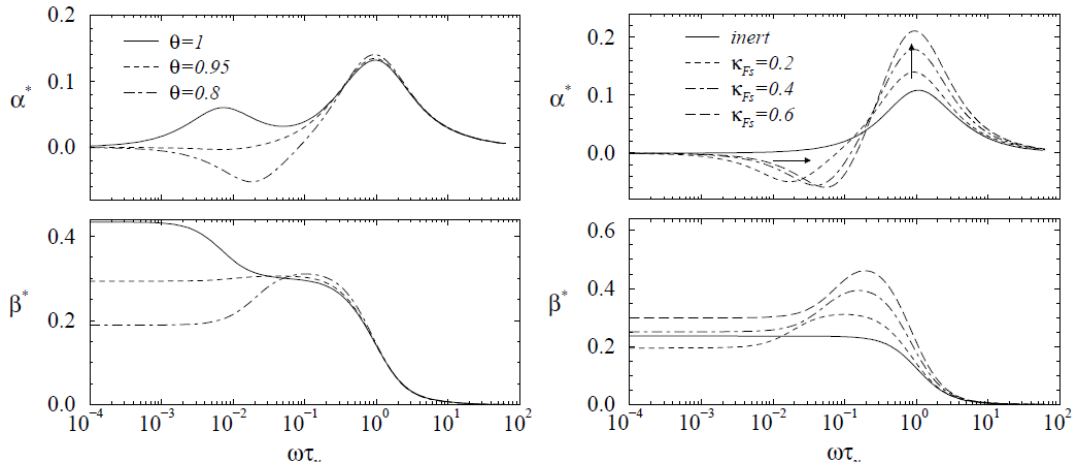


**FIGURE 2.12** – *Atténuation $\alpha^*$ et dispersion $\beta^*$ d'une onde acoustique dans un milieu gaz+gouttes avec une évaporation pilotée par la diffusion des espèces ; études paramétriques sur le déséquilibre thermique $\Theta$ entre phases et sur la fraction massique $\kappa_{Fs}$ de l'espèce évaporante à la surface de la goutte [Dupays, 2002a]*

Les études précédentes ne prennent en compte qu'une seule taille de gouttes ; elles ont été étendues au cas d'un brouillard constitué d'une multitude de tailles de gouttes inertes [Doisneau et al., 2014] ou en évaporation [Sibra et al., 2014]. On parle alors de spray polydisperse. Comme illustré en Fig.(2.13), le passage d'une distribution en taille monodisperse à polydisperse ne change pas le rôle amplificateur ou atténuateur des gouttes sur l'acoustique. Cependant, les niveaux sont différents et

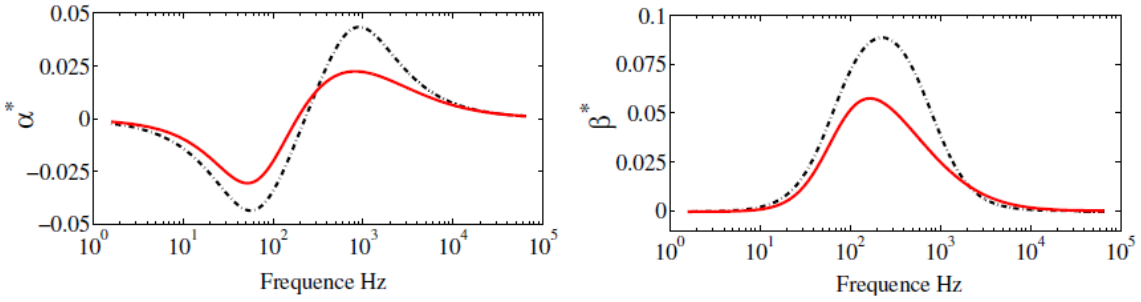


**FIGURE 2.13** – *Atténuation $\alpha^*$ et dispersion $\beta^*$ d'une onde acoustique dans un milieu gaz+gouttes avec une évaporation pilotée par la diffusion thermique ; Distributions en taille type lognormale (courbes rouges continues) et monodisperse équivalent basée sur le calcul d'un diamètre moyen $r_{31}$ (courbes noires discontinues) [Sibra et al., 2014]*

les fréquences acoustiques correspondant aux maxima d'atténuation sont modifiées. Il faut toutefois nuancer ces conclusions car la comparaison bute sur la définition d'un diamètre moyen représentatif de l'effet collectif. En effet, chaque taille de gouttes interagit avec le gaz avec sa propre dynamique. Ainsi, aucun nombre de Stokes préférentiel ne peut être déterminé pour caractériser l'impact d'un spray polydisperse. Pour une granulométrie donnée, la réponse acoustique est donc exprimée en fonction de la fréquence de la perturbation.
Ces résultats sont toutefois à relativiser car ils sont établis dans un contexte restreint d'acoustique linéaire où les fluctuations sont faibles, dans un milieu au repos avec une répartition homogène des gouttes et pour des modèles d'évaporation simplifiés. Bien que les conditions soient fort différentes de celles régnant dans une chambre de moteur, ces études démontrent le rôle des transferts de masse sur l'acoustique. Elles mettent également en évidence les paramètres influents d'un mécanisme d'amplification ou d'atténuation :

– La distribution en taille des gouttes

– La concentration du brouillard de gouttes

– La dynamique des transferts de masse

– La thermophysique des gouttes et de la phase gazeuse

En prime, ces études fournissent aussi des cas de validation appropriés pour les codes de calcul. En effet, les solutions analytiques de la propagation d'une onde acoustique dans un milieu gazeux qui échangent de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie avec un brouillard de gouttes, permettent une validation fine du couplage entre le gaz et le spray. Ces comparaisons entre des solutions analytiques et des résultats de simulations sont d'ailleurs proposées dans §9.2.

#### 2.2.1.3 Modification du Vortex Shedding en présence de particules en combustion

Plusieurs études numériques [Lupoglazoff et al., 2002; Dupays, 2002b; Dupays and Fabignon, 2002] ont été menées sur les configurations moteur de la maquette LP6 et celle du P230 pour évaluer l'impact des gouttes en combustion sur les ODP. Même si le modèle de combustion utilisé est simple et la thermophysique du gaz réduite à celle d'une espèce, l'objectif était de rendre compte des effets possibles des transferts de masse et d'énergie dans une certain volume de la chambre sur les structures hydrodynamiques de l'écoulement. Dans ces études, la contribution de la combustion des gouttes se cumule à celle des résidus d'alumine sur l'écoulement.
Pour la maquette LP6, trois simulations ont été réalisées. Comme évoqué dans §2.2.1.1, la configuration sans particules (Butalite) présentait déjà des instabilités dont l'origine est attribuée à un VSP. Comme illustré par les spectres fréquentiels des instabilités en Fig.(2.14), les deux autres simulations mettent en lumière des mécanismes antagonistes de l'influence des gouttes en combustion sur les ODP. Chaque simulation traite d'une seule taille de gouttes d'aluminium brûlant jusqu'à atteindre la taille du résidu. Les granulométries utilisées sont très proches de celle supposée pour la Butalane du P230 à savoir des globules de 125$\mu$m générant des résidus de 60$\mu$m et des gouttes isolées de 30$\mu$m générant des résidus de 3$\mu$m. Pour les plus petites gouttes, les niveaux sont amplifiés alors que pour les globules une atténuation est observée. Comme illustré en Fig.(2.15),

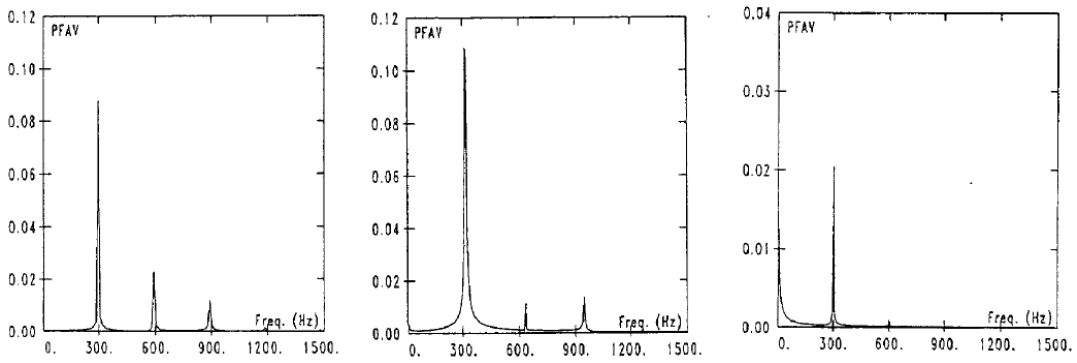


**FIGURE 2.14** – *Spectres fréquentiels des ODP pour la configuration moteur LP6 obtenus à partir de simulations en gaz seul (gauche) et avec prise en compte des gouttes en combustion : Cas d'une concentration massique de 6% de 30$\mu m$ à 3$\mu m$ (milieu) et cas d'une concentration massique de 6% de 125$\mu m$ à 60$\mu m$ (droite) [Lupoglazoff et al., 2002]*

la combustion des gouttes isolées renforce le VSP et son couplage avec l'acoustique de la chambre alors que celle des globules tend à réduire significativement l'intensité du VSP. Les résultats des tirs n°37 et 38 du moteur LP6 utilisant de la Butalane Ariane 5 confirment les résultats de simulations des globules en montrant une atténuation forte des niveaux d'ODP en comparaison de ceux observés avec de la Butalite. Il y a donc bien un effet de la taille sur le Vortex Shedding mais le mécanisme qui explique l'interaction entre la combustion et les structures tourbillonnaires n'est pas bien compris. Il est probable que la libération d'énergie dans une certaine zone localisée, par exemple très proche de la surface pour les gouttes isolées, vienne aider le développement du VSP à la paroi. Cependant, quand la granulométrie est bimodale, comme c'est le cas pour les tirs n°37 et 38, il n'est pas évident d'expliquer pourquoi au final la contribution des plus grosses gouttes l'emporte sur celle des petites.

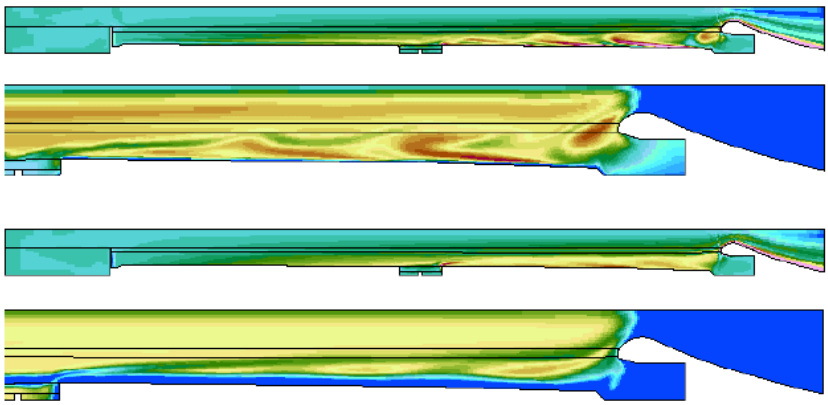

**FIGURE 2.15** – *Visualisation des champs de vorticité pour la configuration moteur LP6 obtenus à partir de simulations avec des gouttes en combustion : Cas des gouttes de 30$\mu m$ (haut) et cas des gouttes de 125$\mu m$ [Dupays, 2002b]*

Des calculs numériques réalisés sur le moteur P230 d'Ariane 5 ont aussi alimenté l'idée que la combustion distribuée avait un impact sur les niveaux des instabilités. En Fig.(2.16), les spectres fréquentiels obtenus, sans ou avec prise en compte de la combustion des gouttes, révèlent une différence notable du couplage entre le VSP et le VSO. Alors qu'en gaz seul, le signal est bruité signifiant que l'accrochage acoustique n'est pas marqué, le cas avec combustion des gouttes montre des fréquences parfaitement identifiées correspondant aux modes acoustiques longitudinaux de la chambre. La taille des gouttes étudiée dans cette étude numérique correspond aux globules de 125$\mu m$. Pour la configuration LP6, qui est une maquette 1/15ème, cette taille de gouttes a conduit à une réduction des niveaux. Les effets d'échelle sont donc très importants. L'épaisseur de la zone de combustion distribuée rapportée au rayon de la chambre est totalement changée. De plus, les fréquences des modes acoustiques et des structures tourbillonnaires dépendent de la géométrie du moteur. Le nombre de Stokes, explicité dans §2.2.1.2, n'est pas le même selon la configuration moteur considérée, et cela en dépit du choix d'une même taille de gouttes. La dynamique des

gouttes et des résidus sur l'aéroacoustique est significativement modifiée.

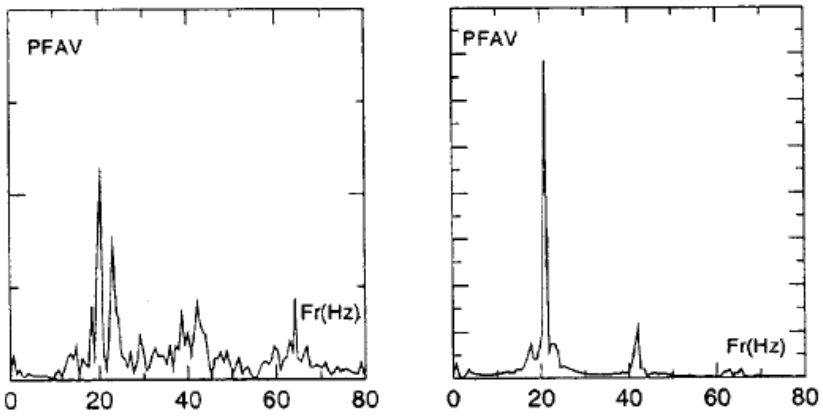


**FIGURE 2.16** – *Spectres fréquentiels des ODP pour la configuration du moteur P230 à 95s obtenus à partir de simulations gaz seul (gauche) et avec prise en compte des gouttes de* $125\mu m$ *en combustion (droite) [Lupoglazoff et al., 2002]*

Il est nécessaire d'être prudent avec l'ensemble des résultats numériques, en particulier sur les valeurs des niveaux ODP obtenus. Les tendances relevées viennent cependant compléter des observations expérimentales et démontrent le potentiel de la simulation numérique pour l'étude des instabilités moteur. Cela justifie également de poursuivre l'effort de modélisation pour améliorer la représentativité de la combustion des gouttes, du suivi de la granulométrie et des échanges avec le milieu gazeux.

### 2.2.2 Instabilité de nature thermoacoustique : Le phénomène ITHAC

Dans les années 70, Beckstead et Culick se sont intéressés aux interactions possibles entre une onde acoustique et la combustion des particules d'aluminium. L'impact de la combustion sur l'acoustique a été confirmé après avoir exploité et analysé les résultats expérimentaux sur les montages T-Burner [Beckstead and Culick, 1971]. Mais c'est l'échec du programme américain de missiles de défense antibalistique SENTRY en 1983 qui a relancé cet intérêt et motivé les nombreux travaux de recherche sur les instabilités dues à la combustion distribuée des particules d'aluminium [Beckstead, 1987]. Alors que le moteur aurait dû être stable, les essais effectués ont mis en évidence des instabilités inexpliquées avec des niveaux inacceptables. Les observations en tir ont donc souligné le rôle de la combustion distribuée sans l'expliquer. Pour appréhender ce phénomène, un montage expérimental, le brûleur de Rijke [Barron, 1991], a été mis au point afin de déterminer la contribution de la combustion des gouttes sur une onde acoustique. Cette expérience qui est une variante du classique tube de Rijke [Rijke, 1859] permet de se placer dans une configuration simplifiée et de s'affranchir d'un grand nombre de phénomènes physiques présents dans un MPS. Le brûleur de Rijke est constitué d'un tube fermé acoustiquement à sa base et d'un accroche-flamme au niveau duquel des particules d'aluminium brûlent. Le profil de température fortement non uniforme entre la zone des gaz frais et celle des gaz brûlés modifie le champ de vitesse du son et la forme des modes acoustiques. Faisant l'analogie avec ce qui passe dans le moteur où les particules brûlent à une certaine hauteur de la surface du propergol, il a été montré [Raun and Beckstead, 1993] que la combustion des gouttes pouvait amplifier l'acoustique du milieu. Cette approche présente toutefois deux différences par rapport à la dynamique de la combustion en propulsion solide : 1- L'absence de l'effet de convection. 2- Un alignement du gradient thermique avec les modes acoustiques alors qu'ils sont perpendiculaires au sein d'un moteur.
Ces différentes expériences ont ainsi mis en évidence une instabilité de type thermoacoustique en l'absence de toute autre source possible d'amplification. Elle se caractérise par une interaction entre la fluctuation du dégagement de chaleur dû à la combustion $Q'$ et les fluctuations de pression $p'$. Dans ce contexte, le critère de Rayleigh permet de déterminer si l'acoustique est amplifiée dans la zone concernée de l'écoulement :

$$\frac{1}{T}\int_{\Gamma}\int_{T} p'\,Q'\mathrm{d}t\mathrm{d}V > 0 \tag{2.1}$$

Dans [Brooks and Beckstead, 1995], le critère d'amplification de l'onde acoustique a identifié plus

spécifiquement la réponse en vitesse de la combustion comme étant le paramètre clé. Ainsi, l'instabilité est présente dans la zone où $p'u' > 0$ comme schématisé en Fig.(2.17).

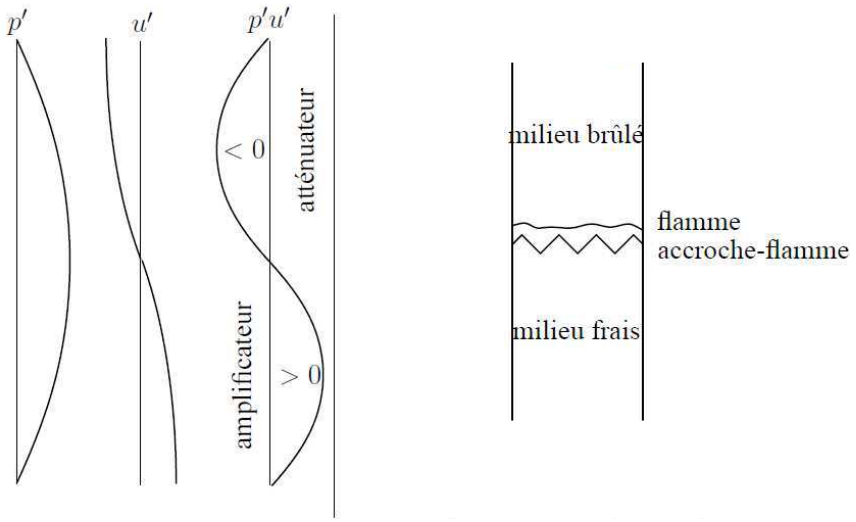


**FIGURE 2.17** – *Zones d'amplification et d'atténuation pour un cas simplifié du tube de Rijke [Radenac, 2009]*

Par la suite, aucune autre étude connue n'a été réalisée aux USA sur la contribution de la combustion des gouttes d'aluminium sur l'acoustique. Il faut attendre la fin des années 2000 et le programme d'étude de fonctionnement du moteur P80 pour relancer le sujet comme illustré en Fig.(2.18). En effet, alors que le moteur était supposé stable car exempt de sources d'instabilités de type VSO et VSP, il est apparu qu'il était le siège d'instabilités de fonctionnement, notamment dans la première partie du tir. SAFRAN HERAKLES (ex-SNPE) avait émis la possibilité d'une instabilité de type thermoacoustique lors de simulations numériques préliminaires. En effet, en utilisant un modèle de combustion simplifié, les simulations [Gallier and Godfroy, 2009] ont montré que la combustion des particules d'aluminium est la source primaire d'une instabilité de fonctionnement. Cette instabilité est appelée dans la communauté propulsion solide l'ITHAC (pour Instabilité THermoACoustique). Dans les faits, aucune expérience n'a à ce jour confirmé la combustion distribuée comme source primaire des ODP dans le P80. Les études menées en Italie [Ferretti et al., 2011] se concentrent davantage sur l'hypothèse d'une instabilité hydrodynamique de type VSA car elle apparaît en début de tir quand le chambrage arrière du propergol est important. Ces derniers n'excluent cependant pas le rôle de la combustion des particules d'aluminium sur l'écoulement interne [Attili et al., 2009]. Côté français, la recherche a été particulièrement active sur le phénomène ITHAC. Les travaux de l'équipe de Beckstead aux USA ont été redécouverts et les conclusions faites à l'époque confirmées. L'idée selon laquelle l'instabilité trouve sa source dans l'interaction entre les fluctuations de pression et le dégagement de chaleur a été renforcée.

Afin d'évaluer la contribution de l'instabilité thermoacoustique dans la stabilité d'un moteur, une étude préliminaire de type bilan acoustique linéaire a donc été proposée [Gallier et al., 2009] pour les écoulements diphasiques réactifs. Pour le cas monophasique, le bilan acoustique a notamment été utilisé par Flandro [Flandro, 1995] en prenant en compte le caractère rotationnel de l'écoulement interne qui caractérise la dynamique des structures tourbillonnaires, sources des Vortex Shedding. Il est à noter que ce type d'analyse linéaire ne permet pas d'évaluer le niveau des instabilités mais est très intéressante du point de vue de la prévision des sources d'instabilités.

Au travers d'études paramétriques, l'épaisseur de la zone de combustion rapportée à celle de la couche limite acoustique [Gallier and Godfroy, 2009; Radenac, 2009] est apparue comme un facteur déterminant dans l'amplification de l'ITHAC. Classiquement utilisée dans les théories linéaires de bilan acoustique [Kuentzmann, 1991], la couche limite acoustique représente la zone mince adjacente à une paroi où l'on retrouve des phénomènes oscillatoires purement acoustiques et de faible amplitude. L'impact de cette couche limite a été analysée et utilisée par [Majdalani et al., 1998; Flandro and Majdalani, 2003]. Ces derniers ont rapidement relevé l'importance des fluctuations de vitesse du champ acoustique. Les récentes études françaises ont finalement démontré que le phénomène ITHAC est maximal quand l'épaisseur de la zone de combustion contient le premier maximum de vitesse de la couche limite acoustique. Le temps de combustion ainsi que la vitesse d'entraînement des particules à la surface du propergol déterminent l'épaisseur de combustion. Ainsi une attention particulière doit être portée sur la description de la combustion des gouttes

d'aluminium.

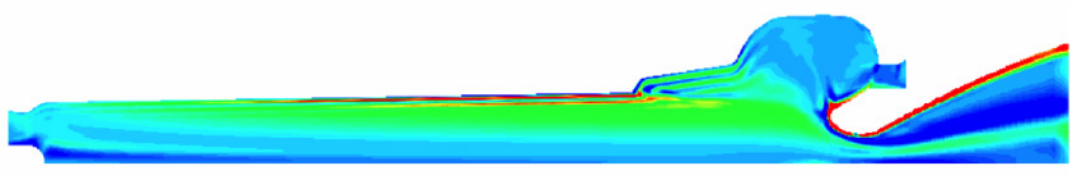

**FIGURE 2.18** – *Vorticité caractérisant le phénomène ITHAC au sein du moteur P80 ©HERAKLES*

De plus, il est apparu que la combustion distribuée est une source déstabilisatrice du premier mode acoustique dans la première moitié amont de la chambre et stabilisatrice dans la seconde moitié aval. C'est la somme de toutes ces contributions faite sur le volume entier de la chambre qui détermine si le moteur est stable ou non. Pour s'approcher au mieux de la physique des moteurs à propergol solide, une stratégie d'étude basée sur la linéarisation des équations de mécanique des fluides et l'évaluation de l'évolution temporelle d'une énergie représentative de l'acoustique a été développée dans [Radenac, 2013], elle est appelée bilan d'énergie fluctuante. Ce dernier prend en compte un grand nombre de phénomènes physiques (rayonnement, relaxation dynamique et thermique des particules...) intégrés sur l'ensemble de la chambre et fournit un taux d'atténuation total. Ce bilan est employé pour le postraitement de simulations numériques et permet une interprétation fine de la contribution du phénomène ITHAC en comparant les contributions à la stabilité linéaire de différents phénomènes.

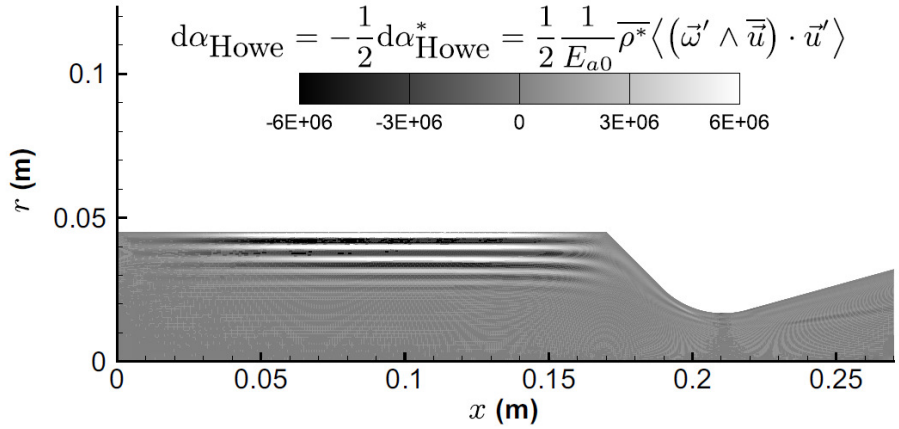


**FIGURE 2.19** – *Influence de la couche limite acoustique sur la vorticité dans la configuration moteur simplifiée TEP [Radenac, 2013]*

Il faut retenir des simulations et de l'analyse du bilan d'énergie fluctuante les résultats et les remarques suivants :

1. Pour être observable, le phénomène ITHAC doit être globalement déstabilisateur sur l'ensemble du volume et doit dépasser l'ensemble des pertes acoustiques.
2. Dans une grande majorité des cas, l'ITHAC est difficilement mis en évidence lorsqu'il est noyé avec d'autres sources d'instabilité comme le Vortex Shedding. Cependant, l'instabilité reste notable lors du développement de VSP de faible intensité.
3. L'épaisseur et la position de la zone de combustion distribuée par rapport au profil de vitesse au sein de la couche limite acoustique contrôle l'intensité de l'ITHAC.
4. Le phénomène est très sensible, ce qui demande, pour être représentatif, de soigner la modélisation de la zone de combustion via le modèle de combustion, la thermodynamique, l'entraînement des particules, la polydispersion etc. Ainsi, obtenir un état final de fin de combustion correct n'est pas suffisant ; la dynamique des transferts de chaleur et l'évolution de la thermodynamique du milieu gazeux et des gouttes doivent être fidèlement restituées.

Ces premières conclusions numériques doivent être confirmées et développées par la prise en compte de modèles de combustion plus représentatifs pour les gouttes d'aluminium. En effet, jusqu'à présent, un modèle simplifié pour les transferts de masse dans un milieu gazeux représenté par une

unique espèce ainsi qu'une description monocomposant de la goutte ont été utilisés dans les configurations "moteur". Le modèle employé est décrit dans §2.4.1.2.

### 2.2.3 Facteurs déterminants pour l'étude de la zone de combustion distribuée

#### 2.2.3.1 Approche de la distribution en taille des gouttes : Notion de polydispersion

La taille est un paramètre clé car elle pilote la dynamique des gouttes. Les distributions en taille doivent être représentées avec fidélité et suivies correctement afin de rendre compte de la physique des problèmes. En propulsion solide, les granulométries rencontrées sont continues et concentrées autour de certaines tailles : on parle alors de modes. Dans le cas de la Butalane d'Ariane 5, nous avons mis en évidence une répartition de la masse typiquement bimodale. D'autres distributions sont possibles allant d'un mode unique à un nombre de modes plus important (cas multi-modal). Toute la difficulté réside dans la représentation de l'ensemble du spectre des tailles de gouttes, on parle d'étude de la polydispersion. Différentes distributions sont envisageables, par exemple sur le nombre ou encore sur la masse des gouttes. Elles s'expriment de manière équivalente en fonction du rayon $r$, du diamètre $d$ et de la surface $S$ si la goutte est sphérique. Nous définissons une fonction de distribution en nombre, notée $f$ et nommée Number Density Function en anglais (avec pour acronyme NDF). Nous introduisons aussi $f^m$ qui est la distribution en masse, nommée Mass Density Function en anglais (avec pour acronyme MDF). Dans la suite de cette thèse, nous utilisons le plus souvent la terminologie anglaise. Pour des gouttes sphériques, la relation entre ces deux fonctions est donnée par :

$$f^m(d) = \rho_l \frac{\pi}{6} d^3 f(d) \tag{2.2}$$

où $\rho_l$ est la masse volumique du liquide. Des fonctions analytiques telles que la fonction lognormale, notée ici $L$, sont communément employées pour décrire les distributions observées expérimentalement :

$$f^m(d) = L_d^m(d) = \frac{1}{d\ln(\sigma_{ln})\sqrt{2\pi}} \exp\left(-0.5\left(\frac{(\ln d - \ln(\mu_{ln}))}{\ln(\sigma_{ln})}\right)^2\right) \tag{2.3}$$

où $\mu_{ln}$ et $\sigma_{ln}$ sont respectivement le diamètre géométrique et l'écart-type géométrique de la distribution. D'autres répartitions sont possibles telles que Rosin-Rammler ou Langmuir.

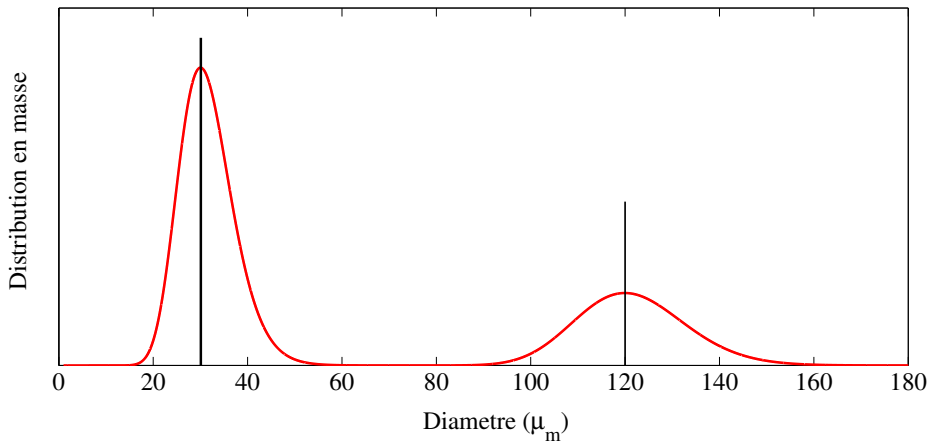


**FIGURE 2.20** – *Exemple d'une distribution bimodale continue en taille des gouttes d'Al et son approche discrète basée sur les modes de la répartition*

Des représentations simplifiées sont souvent utilisées pour décrire de manière discrète les distributions en déterminant des tailles moyennes [Harrje and Reardon, 1972]. En prenant l'exemple de la variable diamètre, ces tailles caractéristiques sont définies par :

$$d_{pq} = \left(\frac{\int_0^{+\infty} d^p f(d)\,\mathrm{d}d}{\int_0^{+\infty} d^q f(d)\,\mathrm{d}d}\right)^{1/p-q} \tag{2.4}$$

Les diamètres moyens utilisés sont par exemple : le diamètre moyen volumique $d_{30}$ ou encore le diamètre moyen de Sauter $d_{32}$. D'autres grandeurs moyennes sont aussi considérées comme le diamètre médian en nombre qui est défini tel que le nombre de particules de taille inférieure à ce dernier correspond à la moitié du nombre total. Le mode de la distribution, diamètre où se situe le maximum du nombre ou de la masse, est un des diamètres le plus fréquemment employé mais il n'a pas d'autres prétentions physiques contrairement aux $d_{30}$, $d_{32}$ ou à d'autres $d_{pq}$. Ainsi, la taille $d_{30}$ est le diamètre de la particule dont le volume multiplié par le nombre de particules est égal au volume occupé par l'ensemble des particules. Le diamètre $d_{32}$ s'interprète comme une mesure du rapport du volume total occupée par les particules sur la surface totale qu'elles occupent.
Finalement, les distributions continues sont approchées par des fonctions Dirac dont les abscisses correspondent aux diamètres moyens $\bar{d}$. Dans les cas monomodale ou bimodale, on parle alors de distributions monodisperse ou bidisperse :

$$MO(d) = \alpha_1 \delta(d - \bar{d}_1), \qquad BI(d) = \alpha_1 \delta(d - \bar{d}_1) + \alpha_2 \delta(d - \bar{d}_2) \tag{2.5}$$

où $\alpha_1$ et $\alpha_2$ sont des concentrations en nombre ou en masse selon la nature de la distribution étudiée. En Fig.(2.20), un exemple de distribution en masse bimodale inspirée de celle supposée de la Butalane d'Ariane 5 ainsi que son équivalent bidisperse sont donnés. Jusqu'à présent, les simulations en propulsion solide ont été faites avec des distributions discrètes, le plus souvent monodisperse. On peut donc se demander quelle est la perte de représentativité d'une telle approche et quel mécanisme justifie le choix d'une taille moyenne plutôt qu'une autre. Il semble évident qu'une distribution répartie sur un grand spectre de taille ne peut être décrite proprement par l'utilisation d'une taille moyenne. Les phénomènes de seuil observés, par exemple pour le P230 avec des gouttes de 30 ou 120$\mu m$, ont toutes les chances d'être plus nuancés pour des distributions polydisperses. Dans cette thèse, on s'intéresse donc à la possibilité de pouvoir décrire avec précision des distributions continues et leur évolution.

#### 2.2.3.2 Importance de l'écoulement autour de la goutte et des conditions proche de la surface

La prise en compte de l'écoulement autour de la goutte est important à double titre :

- Comme cela a été montré numériquement [Orlandi, 2002], la prise en compte de l'écoulement autour de la goutte réduit le temps de combustion. Si l'effet de la convection semble plus faible que celle de la composition des gaz oxydants, elle demeure importante car elle peut modifier significativement la composition du milieu gazeux environnant ou encore changer la position de la flamme de diffusion autour de la goutte.

- La phase d'entraînement des gouttes à partir de la surface du propergol a un fort impact sur l'épaisseur de la zone de combustion mais il est assez délicat d'apprécier cette phase d'accélération. Physiquement, la vitesse des gouttes est nulle dans le repère attaché à la surface de combustion et ce sont les gaz générés par la combustion du propergol qui entraînent ces dernières par des échanges de quantité de mouvement. Quand la fraction volumique locale des gouttes n'est pas trop importante, on parle de phase dispersée diluée ou modérément dense (cf. §3.1.2.2). Dans ce cas, seule la force de traînée assure leur entraînement dans le moteur. Dans le cas d'un écoulement dit dense, des effets de concentration apparaissent. Cela implique de prendre en compte des interactions entre gouttes plus complexes. Cette hypothèse d'écoulement dilué est discutée dans §3.2.3 et détermine le choix de modélisation du spray. Une vitesse initiale d'injection est le plus souvent comprise entre la vitesse de régression du propergol de quelques mm/s et la vitesse d'éjection des gaz de l'ordre de quelques m/s ; la gamme de vitesses est donc importante. L'accélération des gouttes dépend aussi fortement de la taille ce qui renforce l'idée de bien rendre compte de la polydispersion initiale et de son évolution en cours de combustion.

#### 2.2.3.3 Représentativité de la combustion à l'échelle d'une goutte isolée

Alors que les réactions en phase gazeuse entre l'aluminium vapeur et les gaz oxydants entourant la goutte suivent une cinétique très complexe comme présenté dans §2.1.3 et §2.3.2, les premières simulations en "diphasique réactif" se sont limitées, pour la plupart, à l'emploi d'une unique espèce gazeuse correspondant à une espèce globale représentative des produits de combustion avec des propriétés thermophysiques constantes. Cette limitation doit être levée afin d'apprécier au mieux

la dynamique des transferts de masse et d'énergie au sein de la zone de combustion distribuée. Dans ce contexte, la loi d'évaporation est aussi trop simplifiée car elle ne prend pas en compte la présence d'une flamme autour de la goutte.
De plus, l'hypothèse simplificatrice d'une goutte monocomposant a pour conséquence de fournir une thermophysique de la goutte particulièrement limitée alors qu'elle devrait évoluer au cours de la combustion. Des grandeurs caractéristiques telles que la masse volumique ou la capacité calorifique massique de la goutte se retrouvent être les mêmes pour les gouttes en combustion et les résidus alors que les propriétés thermodynamiques de l'aluminium et de l'alumine sont nettement différentes.
Dans l'attente d'observations expérimentales plus précises des mécanismes en jeu dans la zone de réaction en conditions moteurs, nous proposons dans §2.3 un cadre étendu pour la modélisation des gouttes en combustion, à savoir suivre la bicomposition de la goutte et adopter un formalisme approprié à la physique des transferts de masse et de chaleur.

## 2.3 Modélisation de la combustion d'une goutte d'$Al/Al_2O_3$

### 2.3.1 Etat de l'art de la modélisation des gouttes d'aluminium et contexte d'étude de la thèse

Les premières études portant sur la combustion des gouttes d'aluminium se sont appuyées dans un premier temps sur celle des gouttes d'hydrocarbures. La physique diffère pourtant sur plusieurs points essentiels :

- Les réactions hétérogènes en surface qui forme la calotte d'alumine inerte.
- La condensation d'alumine au sein de la flamme générant les fumées et contribuant fortement au dégagement de chaleur.
- La possible rétrodiffusion d'oxydes d'aluminium vers la goutte alimentant le lobe.

Il faut aussi évoquer la rupture possible de la goutte en fin de combustion et son tournoiement provoqué par le décentrement du centre de gravité par le lobe d'alumine. La température d'allumage des gouttes est également difficile à apprécier car elle est déterminée par des mécanismes complexes comme évoqué dans §2.1.2. Ces trois points ne sont pas traités dans cette thèse. Ils sont à la fois particulièrement complexes à décrire et ils représentent un effort de modélisation conséquent par rapport au gain de représentativité attendu.
Les points listés précédemment retiennent notre attention car ils conditionnent deux points influents pour l'étude des instabilités :

- La granulométrie et la concentration des gouttes.
- La dynamique de la combustion et les évolutions thermodynamiques au sein de la zone de combustion distribuée.

Les études menées sur la combustion des gouttes d'aluminium en ambiance moteur sont finalement assez peu nombreuses car les mesures en conditions de tir sont particulièrement difficiles à mettre en place. La plupart des travaux portent sur la combustion de gouttes dans des environnements contrôlés comme évoqué dans §2.1.3. Dans la littérature, deux stratégies ont été employées pour modéliser la combustion d'une goutte isolée d'aluminium : la première porte sur une analyse physique et le développement d'une approche théorique, la seconde se base sur des lois empiriques établies à partir de résultats expérimentaux.

Dans les années 60, un premier modèle analytique [Brzustowski and Glassman, 1964] est proposé en améliorant les théories de flamme de diffusion employées plus classiquement pour les gouttes d'hydrocarbures ; le rayonnement de la flamme dû à la condensation de fumées d'alumine est pris en compte et la température de la flamme est limitée par la température de volatilisation de l'alumine. Une des restrictions majeures de cette approche repose sur la modélisation de la diffusion des espèces. Un modèle similaire est également proposé à l'ONERA dans [Frayssac and Barrere, 1961].
Si un modèle plus avancé présenté dans [Kuehl and Zwillenberg, 1968] étudie la formation d'alumine liquide à la surface de la goutte, c'est le modèle de Law présenté dans [Law, 1973], qui reste, à ce jour, une référence en proposant un formalisme dédié à la rétrodiffusion d'oxydes vers la surface de la goutte et à leur condensation. Ce modèle a notamment été repris dans [Cesco, 1997] pour des simulations numériques dans les MPS en utilisant une approche lagrangienne et par [Daniel, 2000] en utilisant une approche eulérienne. L'hypothèse faite par Law concerne celle d'une épaisseur de flamme de diffusion infiniment mince où le carburant et les oxydants réagissent instantanément mais aussi celle d'une goutte isolée dans un milieu au repos, éliminant ainsi l'effet de la convection. Les développements proposés dans [Turns et al., 1987], puis dans [Brooks and Beckstead, 1995], ont permis de rendre compte de l'écoulement autour de la goutte et des effets de radiation. Plus récemment, une modélisation plus avancée a été proposée [DesJardin et al., 2005] couplant un modèle d'allumage à un modèle de combustion stationnaire reprenant en grande partie l'approche faite par Law.
Ces modèles ont un avantage important dans la mesure où ils permettent de poser les équations régissant les échanges de masse et d'énergie entre le phase gazeuse et les gouttes. Ils sont cependant particulièrement difficiles à utiliser car les propriétés thermophysiques des espèces sont difficiles à

déterminer et le phénomène de rétrodiffusion n'est pas assuré en ambiance moteur.

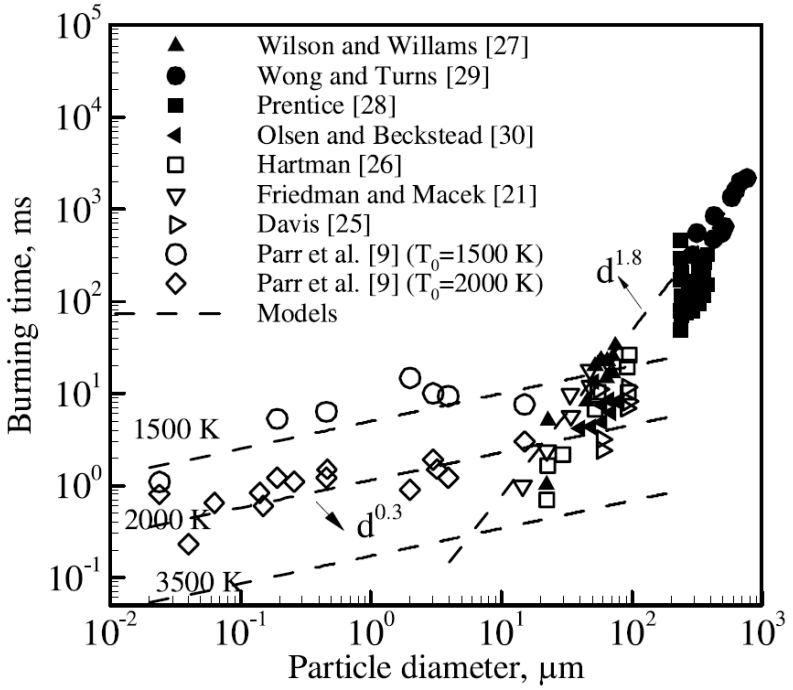


**FIGURE 2.21** – *Compilation de données expérimentales des temps de combustion des gouttes isolées d'aluminium et des lois de régression associées. Les références figurant dans le diagramme sont données dans [Huang et al., 2007]*

Face à la difficulté de mise en oeuvre des modèles précédents, sont souvent privilégiés des modèles de combustion basés sur des lois de régression du diamètre. Ces lois d'évolution sont dites lois en $d^2$, où le diamètre au carré décroît linéairement en fonction du temps :

$$d^2 = d_0^2 - \beta t \tag{2.6}$$

avec $d_0$ le diamètre initial de la goutte, $t$ le temps et $\beta$ le taux de combustion. La spécificité de la combustion des gouttes d'aluminium est la condensation des fumées d'oxydes qui tend à ralentir la combustion. La démarche a donc été de remplacer l'exposant 2 de la loi de régression par une valeur plus générique $n$ à déterminer par des observations expérimentales. Ce facteur est tout d'abord évalué entre 1,5 et 2 dans [Wilson and Williams, 1971] pour une goutte d'aluminium de $50\mu m$ brûlant dans une atmosphère $O_2/Ar$. Par une approche numérique et en s'intéressant à une cinétique de réaction entre l'aluminium et le $CO_2$, King évalue la valeur de l'exposant entre 1,35 et 1,9 [King, 1977; King, 1979] pour des gouttes de $30\mu m$. Faisant suite aux travaux de [Belyaev et al., 1968], l'influence de la composition du gaz environnant a été étudiée afin de mettre en évidence le rôle joué par la fraction massique d'oxygène et de vapeur d'eau [Prentice, 1974].
Pour se rapprocher au mieux des conditions ambiantes dans la chambre d'un MPS, Hermsen s'est appuyé sur l'ensemble des travaux précédents et des observations expérimentales et a établi une corrélation empirique [Hermsen, 1981a] mettant en jeu les effets de plusieurs paramètres : la pression et la composition du gaz environnant qui évolue au cours de la combustion. Ainsi, au cours de l'étude menée par Hermsen portant plus spécifiquement sur la combustion des agglomérats dans les MPS, l'exposant $n$ a été estimé à 1,8 et le taux de combustion $\beta$ est obtenu de manière à prendre en compte des conditions réalistes. Finalement, Sabnis a repris ses travaux et a enrichi la corrélation en ajoutant l'effet de la convection de la phase gazeuse autour de la goutte tout en négligeant les effets radiatifs. La loi de régression s'écrit alors [Sabnis et al., 1991] :

$$\beta = 8.3314\,10^{-5}\,A_k^{0.9}\,p^{0.27}\,\frac{\mathrm{Sh_c}}{2}, \qquad A_k = 100\sum_i X_i,\ i \in [CO_2, H_2O, O_2, OH, O] \tag{2.7}$$

où $\mathrm{Sh_c}$ est le nombre de Sherwood prenant en compte les effets convectifs ; il suit la corrélation de Ranz-Marshall donnée par Eq.(2.17). Le terme $X_i$ représente la fraction molaire de l'espèce $i$. C'est cette version modernisée de la corrélation de Hermsen qui a été utilisée dans [Cesco, 1997; Basset, 1997].

Ces modèles de combustion basés uniquement sur des corrélations empiriques de lois du $d^n$ offrent à la fois une simplicité d'emploi, car les mécanismes d'échange de masse et d'énergie sont extrêmement simplifiés mais aussi des résultats très satisfaisant dans la mesure où ils sont paramétrés à partir d'une banque de données expérimentales provenant d'essais moteurs. Dans [Beckstead, 2005], Beckstead a compilé un grand nombre de données provenant d'expériences en condition moteur et en atmosphère contrôlée. De cette compilation, Beckstead a tiré une corrélation en $d^{1.8}$ du temps de combustion en fonction du diamètre initial ; corrélation que nous exploiterons d'ailleurs plus loin (cf. §2.4.1.3). A cette compilation, des données supplémentaires ont été ajoutées par [Huang et al., 2007] pour les plus petits diamètres comme illustré en Fig.(2.21).
Le principal inconvénient de ces approches empiriques est que les transferts de masse entre la goutte et son environnement gazeux multiespèce sont mal décrits.

Dans le cadre de cette thèse, nous proposons plusieurs points d'amélioration pour des modèles existants ainsi que l'utilisation d'un nouveau modèle de combustion à l'échelle d'une goutte isolée. L'objectif est d'obtenir un formalisme rigoureux pour la loi d'évaporation et de structurer la physique autour d'une thermodynamique dédiée à la phase liquide et d'une description représentative de la phase gazeuse multiespèce. Voici les points clés de modélisation pour lesquels des améliorations sont apportées :

1. Trouver un compromis entre une étude complète de la flamme et de l'environnement gazeux multiespèce et un modèle réduit représentatif de la dynamique de la combustion, envisageable pour des simulations numériques à l'échelle d'un moteur.

2. Prendre en compte la nature bicomposant des gouttes. L'évolution de taille de la particule n'est plus uniquement due à la perte de masse d'aluminium par évaporation mais aussi aux différences de masses volumiques entre l'aluminium et l'alumine dont les proportions en masses changent au cours de la combustion. La présence d'un lobe d'alumine est également considérée comme une surface limitant les transferts de masse.

### 2.3.2 Modélisation de l'évaporation et de la flamme de diffusion dans un milieu gazeux multiespèce

La combustion d'une goutte placée dans un milieu gazeux multiespèce composé de gaz oxydants suit des mécanismes de diffusion d'espèces et de chaleur. La formulation sous la forme d'un modèle de flamme de diffusion semble la plus rigoureuse. Dans cette approche, l'aluminium liquide s'évapore et rencontre les éléments oxydants qui diffusent vers la goutte pour réagir dans une zone de réaction où s'établit finalement la flamme. La dynamique de la combustion est pilotée par la vitesse de diffusion des espèces combustible et oxydant. Trois éléments sont à prendre en compte : 1- La consommation des espèces au niveau de la flamme. 2- La production de produits de combustion. 3- Le dégagement de chaleur. L'effort de modélisation porte donc sur deux points : la loi d'évaporation de l'aluminium et la représentation de la flamme. Il existe aussi deux approches selon que la cinétique de réaction dans le front de flamme est infiniment rapide ou finie (respectivement les cas b) et c) de la Fig.(2.22)).

Dans le cas simplifié d'une approche monoespèce pour le gaz, il ne peut y avoir de diffusion d'espèces et d'étude de flamme (cas a) de la Fig.(2.22)). La stratégie consiste donc à relier la production de chaleur à la quantité d'aluminium liquide supposée avoir brûlé. Les grandeurs caractéristiques de l'unique espèce gazeuse, notée PC, se déterminent à partir de calculs d'équilibre thermodynamique et d'une moyenne faite sur l'ensemble des produits de combustion, des fumées et éventuellement des résidus d'alumine. La masse molaire et la capacité calorifique massique du PC sont fixées pour l'ensemble du calcul et correspondent à une composition unique du propergol et à un point de fonctionnement du moteur donné. Ces calculs d'équilibre thermodynamique sont obtenus à partir du code COPPELIA, développé à l'ONERA [Bourasseau, 1986]. Ce dernier fournit la composition et la thermodynamique du mélange en fin de combustion par une minimisation de l'énergie libre de Gibbs en s'appuyant sur les hypothèses suivantes :

– La combustion est adiabatique et complète.

– La pression est constante.

– Il y a équilibre chimique.

– Le mélange gazeux est un gaz parfait.

L'élévation de la température du gaz s'établit en supposant une chaleur de réaction constante. Cette valeur est calculée de manière à retrouver la température de fin de combustion pour une certaine masse d'aluminium consommée. Nous utilisons dans cette thèse un modèle monoespèce, appelé ASSM. Ce dernier est présenté dans §2.4.1.2.

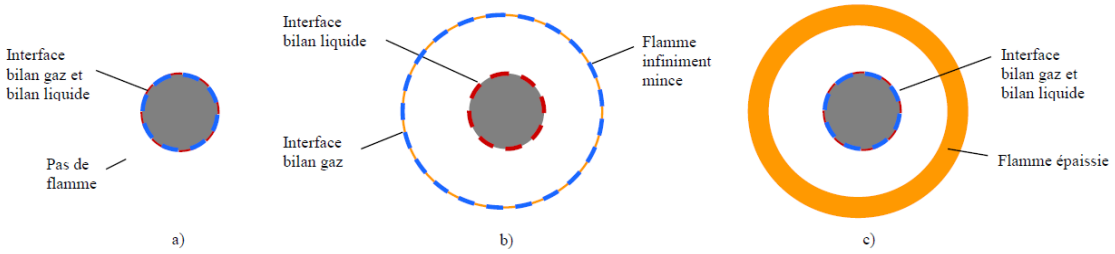


**FIGURE 2.22** – *Illustrations des différents modèles de flamme et d'interfaces : a) Pas de flamme, b) Flamme mince et cinétique infiniment rapide et c) Flamme épaissie et cinétique finie [Dupays, 2009]*

L'approche multiespèce nécessite de résoudre le transport et la diffusion de chaque espèce, de connaître leurs propriétés mais aussi d'étudier le système réactionnel global. Ce dernier est particulièrement difficile à mettre en place car il s'agit de décrire les réactions chimiques en phase gazeuse ainsi que la condensation dans la flamme et au niveau de la surface de la goutte. Une telle étude a été proposée dans les travaux de Beckstead [Beckstead, 2002]. Dans [Orlandi, 2002], Orlandi utilise un solveur cinétique pour ne traiter que les réactions en phase gazeuse en retenant 10 réactions et 13 espèces. Comme évoqué dans §2.1.3, des systèmes plus complexes existent [Swihart and Catoire, 2000]. La résolution d'un très grand nombre d'équations de réactions paraît encore trop lourde pour être utilisée dans le cadre d'un calcul moteur. On préfère alors une description simplifiée du gaz en introduisant des pseudo-espèces, encore nommées espèces globales. Dans cette approche, la cinétique de réaction est infiniment rapide (cas b) de la Fig.(2.22)) ; les réactions en phase gazeuse ne sont donc pas explicitement résolues. La zone comprise entre la surface de la goutte et la flamme n'est pas décrite par les équations régissant le gaz, l'aluminium gazeux n'est pas suivi en tant qu'espèce mais est utilisé au sein d'une équation de réaction globale (présentée en Eq.(2.23)).
Cette stratégie est adoptée par l'IUSTI [Basset, 1997; Daniel, 2000] et Monavon [Monavon, 2005] ; elle consiste à définir une espèce OX, qui regroupe les principales espèces oxydantes telles que $H_2O$ et $CO_2$ et une espèce PC qui représente les produits de combustion et les fumées d'alumine. Une espèce IN pour les gaz inertes est également employée. Dans le cadre de cette thèse, un modèle à deux espèces globales OX et PC est introduit et décrit dans §2.4.2. Il repose sur la détermination d'un coefficient stoechiométrique pour la réaction globale et sur l'obtention de propriétés thermophysiques pour les espèces globales comme exposé dans [Dupays, 2013].
Il faut retenir que ce modèle permet de suivre l'évolution de la composition et des propriétés de la phase gazeuse, d'avoir une dynamique de la combustion régie par des mécanismes physiques. Il a également l'avantage de ne considérer que deux espèces pour la description du gaz ce qui limite significativement l'augmentation du temps de calcul par rapport à une approche basée sur un très grand nombre d'espèces impliquant la résolution d'un système réactionnel.

### 2.3.3 Choix de la thermodynamique et de la géométrie de la goutte bicomposant

Nous définissons $m_p$ comme la masse totale d'une goutte ; les termes $m_{al}$ et $m_{ox}$ sont respectivement les masses d'aluminium et d'alumine contenues dans la goutte. Les fractions massiques de ces deux composants sont déterminées par :

$$Y_{al} = \frac{m_{al}}{m_{al} + m_{ox}}, \qquad Y_{ox} = \frac{m_{ox}}{m_{al} + m_{ox}} \tag{2.8}$$

Le volume de la goutte $V$ s'écrit :

$$V = V_{al} + V_{ox} = \frac{m_{al}}{\rho_{al}} + \frac{m_{ox}}{\rho_{ox}} \tag{2.9}$$

où $V_{al}$ et $V_{ox}$ sont respectivement les volumes occupés par l'aluminium et l'alumine au sein de la goutte. Les termes $\rho_{al}$ et $\rho_{ox}$ sont les masses volumiques des composants liquides. En raison des conductivités particulièrement élevées des deux composants, il est largement licite d'appliquer un modèle de conductivité infinie pour lequel la goutte ne présente donc pas de gradient interne et la température est la même pour les deux composants. De plus, sa température ne varie pas au cours de la combustion ce qui implique que les masses volumiques sont constantes et la masse volumique moyenne de la goutte bicomposant n'est fonction que de sa composition :

$$\rho_p = \frac{V_{al}\rho_{al} + V_{ox}\rho_{ox}}{V_{al} + V_{ox}} = \alpha_{al}\rho_{al} + \alpha_{ox}\rho_{ox} \tag{2.10}$$

où $\alpha_{al}$ et $\alpha_{ox}$ représentent les fractions volumiques de chacun des composants rapportées au volume de la goutte. La masse volumique moyenne se calcule également en fonction de la taille de la goutte en cours de combustion et de celle du résidu. On note respectivement $d_{res}$ et $r_{res}$ le diamètre et le rayon du résidu qui est supposé sphérique à la fin de la combustion. On obtient alors :

$$\rho_p = \left(1 - \frac{d_{res}^3}{d^3}\right)\rho_{al} + \frac{d_{res}^3}{d^3}\rho_{ox} \tag{2.11}$$

Souhaitant prendre en compte précisément les transferts de masse avec le milieu environnant, un modèle géométrique est souhaitable. En effet, les modèles d'évaporation pour des gouttes mono-composants considèrent que toute la surface de la goutte interagit avec le gaz. Cependant, cette hypothèse n'est plus valable pour les gouttes $Al/Al_2O_3$ où la calotte d'alumine occulte une partie de la surface d'échange ce qui a pour conséquence de changer la dynamique de l'évaporation, notamment le temps de combustion. Comme évoqué dans §2.1.3, des observations expérimentales montrent que l'aluminium et son oxyde se présentent sous la forme de sphères partielles qui s'organisent selon une géométrie complexe. Dans l'ensemble de ce travail, il est choisi un modèle simplifié basé sur le choix d'une calotte sphérique, comme illustré dans la Fig.(2.23). Nous supposons alors que le transfert de masse n'a lieu qu'au niveau de la surface libre. Pour ce modèle géométrique, la surface de la calotte, notée $S_{ox}$, se détermine à partir de sa hauteur $h$ et du rayon de la goutte $r$. Ces deux paramètres sont obtenus à partir des volumes occupés par l'aluminium $V_{al}$ et l'alumine $V_{ox}$, supposés connus [Temkin, 2005] :

$$V_{al} = \frac{4\pi}{3}\,r^3 - \frac{2\,\pi}{3}\,h\,r^2, \qquad V_{ox} = \frac{\pi}{6}d_{res}^3 \tag{2.12}$$

Finalement, la surface d'échange entre la goutte et le gaz, notée $S_{al}$, est donnée par : $S_{al} = 2\pi r(2r-h)$. Notons ici que $S = S_{ox}+S_{al}$ est la surface totale de la goutte. L'évolution de la hauteur de la calotte $h$ est obtenue en déterminant la racine du polynôme d'ordre 3 : $2h^3 - 6rh^2 + d_{res}^2$. Une résolution analytique du polynôme basée sur la méthode de Cardan est employée.

On définit aussi l'enthalpie $h_p$ ou l'énergie interne $e_p$ de la goutte par :

$$h_p = Y_{al}h_{al} + Y_{ox}h_{ox}, \qquad e_p = Y_{al}e_{al} + Y_{ox}e_{ox} \tag{2.13}$$

Il est possible de faire le lien entre l'énergie interne de la goutte et son enthalpie par la relation : $h_p = e_p + p_p/\rho_p$ où $p_p$ est la pression interne de la goutte. Cette pression a pour origine la compressibilité des particules. Si on néglige la compressibilité et qu'on suppose la particule rigide (démarche valable pour des particules dans un gaz par exemple) alors cette pression "particulaire" tend vers zéro [Temkin, 2005], ce qui nous conduit à assimiler l'enthalpie à l'énergie interne. Ce choix de modélisation est le même quelle que soit la nature des gouttes étudiées dans cette thèse. La capacité calorifique moyenne $c_{p,p}$ s'écrit :

$$c_{p,p} = Y_{al}c_{p,al} + Y_{ox}c_{p,ox} \tag{2.14}$$

où $c_{p,al}$ et $c_{p,ox}$ sont les capacités calorifiques massiques de chacun des composants, constants au cours de la combustion (la température de la goutte ne variant pas). Par contre, la capacité calorifique moyenne évolue car la composition de la goutte varie.

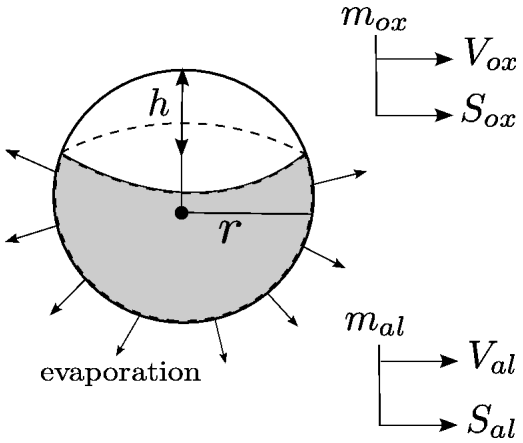


**FIGURE 2.23** – *Modèle géométrique pour le lobe d'alumine d'une goutte d'aluminium oxydée [Sibra et al., 2013]*

## 2.4 Présentation des modèles de combustion et améliorations

Nous présentons dans cette partie trois modèles de combustion valables à l'échelle d'une goutte isolée et de taille micronique. Les deux premiers, développés dans le cadre du programme ASSM, adoptent une approche monoespèce pour le gaz et une description monocomposant de la goutte. Dans le cadre de cette thèse, une amélioration majeure est proposée en prenant en compte la bicomposition de la goutte. Puis, nous introduisons un nouveau modèle de combustion piloté par une loi d'évaporation basée sur la diffusion des espèces. Ce modèle se caractérise par une réduction du nombre d'espèces à deux espèces globales. Les principales hypothèses et étapes de dérivation sont exposées. Il est ensuite établi la démarche à suivre pour la mise en données des calculs de combustion proposés par la suite dans cette thèse. Notons également que ces modèles sont compatibles avec l'approche cinétique de type spray qui est présentée dans le chapitre §3.

### 2.4.1 Approche monoespèce : modèles existants avec prise en compte de la bicomposition

#### 2.4.1.1 Traitement séquentiel des phases de chauffage, d'allumage et de combustion

Pour les deux modèles de combustion monoespèce, plusieurs situations sont à considérer selon que :

- La goutte a atteint la taille souhaitée $d_{res}$ pour les résidus d'alumine, elle ne peut que chauffer ou refroidir comme le ferait une particule inerte. Il n'y a alors pas d'échanges de masse avec l'environnement. Le terme d'échange de chaleur pour une goutte isolée est noté $\mathrm{H}_p$.

- La goutte n'a pas atteint la taille des résidus, plusieurs configurations sont possibles : soit la température de la goutte $T$ est au moins égale à sa température de saturation $T_{sat}$ ce qui signifie que nous sommes dans la phase de combustion, soit elle a une température inférieure, il reste alors à discriminer deux cas qui sont : la température de la goutte est inférieure à la température d'allumage $T_{allum}$, la goutte n'échange pas de masse, seulement de la chaleur à la manière d'une goutte inerte. La goutte a une température supérieure à celle d'allumage, elle échange alors de la masse avec le milieu environnement. Le taux d'évaporation massique est noté $\dot{m}_p$ pour une goutte isolée.

Dans le contexte d'étude que nous nous sommes fixés, les phases de chauffage avant allumage et d'allumage ne sont pas traitées. En effet, les gouttes sont supposées avoir atteint leur température de saturation dès qu'elles quittent la surface. Deux situations sont alors possibles :

$$\begin{aligned} &\text{Si } d = d_{res}, \quad \text{Chauffage/Refroidissement inerte :} \quad \dot{m}_p = 0 \quad \mathrm{H}_p \neq 0 \\ &\text{Si } d > d_{res}, \quad T = T_{sat} \Rightarrow \text{Combustion :} \qquad\quad \dot{m}_p \neq 0 \quad \mathrm{H}_p = 0 \end{aligned} \tag{2.15}$$

Nous présentons dans cette partie uniquement les lois qui régissent les transferts de masse. Le traitement de la phase de chauffage du résidu en fin de combustion est présenté dans le cadre classique d'une goutte inerte dans §3.4.1.2.

#### 2.4.1.2 Modèle ASSM basé sur la diffusion thermique

Ce modèle de combustion utilisé dans [Lupoglazoff et al., 2002; Gallier and Godfroy, 2009] et développé au cours du programme ASSM est dérivé d'une loi d'évaporation du $d^2$. L'unique espèce gazeuse correspond au produit de la combustion d'une espèce oxydante et de la vapeur d'aluminium. Le terme de transfert de masse $\dot{m}_p$ ne repose que sur la diffusion de chaleur entre la goutte et le gaz. Un terme représentatif de la production d'énergie $Q_r$ due à la combustion de la goutte est pris en compte :

$$\dot{m}_p = \pi\, d\, \frac{\lambda_g}{c_{p,g}}\, \mathrm{Sh_c}\, \ln(1+B_T), \qquad B_T = \frac{c_{p,g}(T_g - T) + Q_r}{L_v} \tag{2.16}$$

où $\lambda_g$ est la conductivité thermique du gaz, $c_{p,g}$ est sa capacité thermique à pression constante, $L_v$ est la chaleur latente de vaporisation de l'aluminium, $T_s$ est la température de surface de la goutte et $B_T$ est le nombre de Spalding ; il témoigne du taux de transfert de chaleur. Le terme $\mathrm{Sh_c}$ est le nombre de Sherwood qui rend compte des effets convectifs de l'écoulement autour de la goutte. Il s'exprime de la manière suivante :

$$\mathrm{Sh_c} = 2 + 0.552\, Re_p^{1/2}\, \mathrm{Sc}^{1/3} \tag{2.17}$$

où $\mathrm{Sh_c}$ est le nombre de Sherwood correctif et $Re_p$ est le Reynolds particulaire défini par : $Re_p = \rho_g\, d \|\mathbf{u_g} - \mathbf{u}\|/\mu_g$. Plus de détails sur les régimes d'écoulements autour de la goutte sont donnés dans §3.4.1.1.
La température de surface est supposée constante au cours de la combustion et égale à la température de saturation de la goutte. La température du gaz augmente grâce à une définition appropriée des enthalpies de l'aluminium liquide et de l'espèce produit de combustion, notée PC. Cela assure ainsi un apport correct d'énergie à la phase gazeuse. C'est de cette manière que le terme d'énergie produite $Q_r$ est déterminé ; il est constant pour une configuration donnée.

#### 2.4.1.3 Modèle en $d^n$ ou loi empirique ONERA

Le modèle en $d^n$, appelé aussi loi ONERA, consiste à améliorer le modèle ASSM en déterminant le temps de combustion de la goutte à partir de la corrélation de Beckstead [Beckstead, 2002] qui est fonction des valeurs de la pression, de la température et de la composition des gaz oxydants entourant la goutte. Cette corrélation empirique est valable pour des gouttes de taille micronique et est établie par rapport à un ensemble d'expériences et de simulations numériques. Le temps de combustion de la goutte, noté $\tau_{comb}$, s'exprime de la manière suivante :

$$\tau_{comb} = \frac{d_0^n}{k\, X_{eff}^{n_1}\, p^{n_2}\, T^{n_3}}, \quad X_{eff} = aX_{O_2} + bX_{H_2O} + cX_{CO_2} \tag{2.18}$$

où $d_0$ est le diamètre initial de la goutte, $k$ est une constante du modèle et $X_{eff}$ est la fraction molaire efficace des oxydants pondérée des coefficients $a$, $b$ et $c$ sur les espèces $O_2$, $H_2O$ et $CO_2$ considérées comme les principaux oxydants. Les valeurs des coefficients $n_1$, $n_2$ et $n_3$ donnés en Tab.(2.2) soulignent le fait que le temps de combustion est moins sensible à la pression et à la température qu'à la composition gazeuse. L'appauvrissement en oxydants impacte donc significativement le temps de combustion. Cela montre au passage qu'une approche multiespèce semble incontournable.

**TABLE 2.2** – *Coefficients du modèle en $d^n$ selon Beckstead [Beckstead, 2002]*

| $n$ | $k$ |
|---|---|
| 1.8 | $6.26510^{-7}$ |

| a | b | c | $n_1$ | $n_2$ | $n_3$ |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 0.6 | 0.22 | 1 | 0.1 | 0.2 |

Il existe deux variantes de ce modèle : La première détermine le temps de combustion en fonction des valeurs initiales de pression, de température et de composition ce qui est finalement assez peu représentatif de l'environnement au sein d'un MPS mais plus conforme à la façon dont a été

déterminée cette loi. La seconde utilise des valeurs réactualisées. Dans une approche monoespèce, ces espèces ne sont pas explicitement suivies mais peuvent être déduites d'une corrélation mettant en jeu une évolution de la composition fonction de la température ambiante.
La combustion étant stoppée quand la taille de la goutte atteint celle du résidu, une loi de régression spécifique est établie :

$$d^n = d_0^n - (d_0^n - d_{res}^n)\frac{t - t_0}{\tau_{comb}} \tag{2.19}$$

où $t_0$ est le temps correspondant au début de la combustion. Cette relation ne permet pas de rendre compte d'une géométrie complexe de la goutte, par exemple de sa non sphéricité due au lobe d'alumine. Le débit massique d'une goutte d'aluminium peut être calculé de la manière suivante : $\dot{m}_p = -\mathrm{d}_t\,(\rho_{al} V_{al})$. La masse volumique de l'aluminium est constante car la température de la goutte n'évolue pas au cours de la combustion. Le débit massique s'exprime donc de la manière suivante :

$$\dot{m}_p = \frac{\mathrm{Sh_c}}{2}\,\frac{\pi}{2\,n}\,\rho_{al}\,\frac{d_0^n - d_{res}^n}{\tau_{comb}}\,d^{3-n} \tag{2.20}$$

En définitive, les données d'entrées du modèle sont les diamètres $d_0$ et $d_{res}$, la température de la goutte qui conditionne la masse volumique de l'aluminium constante pour le reste du calcul et $X_{eff}$ fixé ou non au début de la simulation selon que l'évolution de la composition des oxydants est prise en compte ou non.

#### 2.4.1.4 Point d'amélioration : Prise en compte de la bicomposition de la goutte

La bicomposition de la goutte a deux conséquences :

– La thermophysique de la goutte, à savoir sa capacité calorifique massique et sa masse volumique, évolue au cours de la combustion.

– La prise en compte du lobe inerte d'alumine impacte la dynamique de la combustion, nous obtenons notamment un temps de combustion plus long.

Nous présentons donc nos choix de modélisation en deux temps :

1. Pour un grand nombre d'études numériques MPS, une approche simplifiée de la thermophysique est choisie ; les grandeurs caractéristiques des gouttes demeurent constantes pour l'ensemble du calcul. La goutte est donc monocomposant et des valeurs moyennes sont déterminées de telle manière à concilier un bilan énergétique correct ainsi que des temps de combustion réalistes. Cependant, ce choix de modélisation est restrictif pour un calcul moteur complet car si la combustion semble être correctement reproduite, l'approche faite sur les résidus n'est pas appropriée. En effet, comme illustré dans Tab.(2.3), les écarts entre les grandeurs thermophysiques de l'aluminium et de son oxyde sont importants. Par exemple, pour une masse volumique moyenne égale à 2000kg/m$^3$, une erreur de plus de 29% est commise sur la valeur réelle de la masse volumique du résidu d'alumine. Donné en Eq.(3.46), le temps de relaxation de la particule $\tau_u$ dépendant proportionnellement de la masse volumique, le comportement dynamique du résidu s'en trouve significativement modifié. Les interactions entre les particules et l'hydrodynamique, et donc la dispersion des résidus dans la chambre, ne sont pas correctement restituées.

**TABLE 2.3** – *Exemples de grandeurs thermophysiques pour l'aluminium et l'alumine liquides à T=3000K*

| | Aluminium $Al$ | Alumine $Al_2O_3$ |
|---|---|---|
| Capacité calorifique massique (J/kg/K) | 1284 | 1888 |
| Masse volumique (kg/m$^3$) | 1424 | 2824 |

Dans le cadre de cette thèse, nous prenons systématiquement en compte la thermophysique d'une goutte bicomposant. Cette approche est compatible avec les modèles ASSM et en $d^n$ et ne nécessite aucun développement particulier. En effet, nous utilisons les Eq.(2.11) et (2.14) qui sont fonction des tailles de la particule à un instant donné et de celle du résidu final. Pour les deux modèles de combustion, ce sont des grandeurs connues.

2. La prise en compte du lobe d'alumine est applicable au modèle ASSM et ne revient qu'à ajouter un terme correctif sur le débit massique d'aluminium évaporé :

$$\dot{m}_p = \pi \frac{S_{al}}{S} d \frac{\lambda_g}{c_{p,g}} \mathrm{Sh_c} \ln(1 + B_T) \tag{2.21}$$

Le terme $S_{al}/S$ tend à décroître au cours de la combustion car la surface d'échange $S_{al}$ entre l'aluminium et le gaz diminue. Une valeur minimale est fixée afin que la combustion ne soit pas infiniment longue. Des résultats de calculs utilisant ce terme correctif sont proposés dans §8.3.3. Ils ne tiennent cependant pas compte d'un éventuel grossissement du lobe au cours de la combustion car le modèle utilisé pour décrire le spray ne permet pas de suivre la composition en aluminium et en alumine des gouttes. Nous développons donc dans le chapitre 6 des méthodes numériques dédiées à cette problématique.

Pour le modèle $d^n$, aucun terme correctif n'est à considérer car c'est au travers du calcul du temps de combustion $\tau_{comb}$, plus précisément de l'exposant $n$ que le lobe d'alumine est pris en compte. On rappelle que ce modèle est paramétré en fonction d'observations expérimentales ce qui signifie que les données d'entrée sont celles d'une goutte bicomposant. Le grossissement du lobe, si il a lieu, est également considéré. La seule incertitude reste la validité de la corrélation de Beckstead, donnée en Eq.(2.18), pour des conditions moteur et pour toutes les tailles de gouttes étudiées.

### 2.4.2 Approche biespèce globale : Nouveau modèle dit de "Diffusion"

Nous présentons ici les principales étapes de dérivation d'un nouveau modèle de combustion pour lequel la bicomposition des gouttes et la modification des propriétés du mélange gazeux au cours du temps par l'emploi de deux espèces globales OX et PC ont été considérées. La composition des espèces globales est donnée en Tab.(2.4). Le développement de ce modèle est proposé dans [Dupays, 2013] ; il est repris dans le cadre de cette thèse au travers d'une étude comparative entre les différents modèles de combustion dans le chapitre 11 et de calculs de démonstration réalisés pour le moteur P230 dans le chapitre §13.

**TABLE 2.4** – *Composition des deux espèces globales OX et PC*

| | |
|---|---|
| OX | $H_2O$, $CO_2$ |
| PC | $H_2$, $CO$, $Al_2O_3$, $H$, $Cl$, $AlCl$, $OH$, $AlCl_2$, $AlClO$, $AlHO_2$, $NO$ |

Le débit évaporé est déterminé à partir d'un bilan de masse tel que :

$$\dot{m}_p = \frac{1}{\frac{r^2}{S}\int_r^\infty \frac{1}{x^2 \rho D} \mathrm{d}x} \ln(1 + B_M), \quad B_M = \frac{Y^+_{Al,s} - Y_{Al,\infty} + (Y_{OX,\infty} - Y^+_{OX,s})/s}{1 - Y^+_{Al,s} + Y^+_{OX,s}/s} \tag{2.22}$$

où $S$ représente la surface débitante (ici la surface de la goutte), D est le terme de diffusion des espèces et $B_M$ est le nombre de Spalding massique qui représente le transfert de masse. Les termes $Y^+_{Al,s}$ et $Y_{Al,\infty}$ sont respectivement les fractions massiques de vapeur d'aluminium à la surface de la goutte et loin de cette dernière. Les termes $Y^+_{OX,s}$ et $Y_{OX,\infty}$ sont respectivement les fractions massiques de l'espèce oxydante globale OX à la surface de la goutte et à l'infini. Le terme $s$ représente le coefficient stoechiométrique de la réaction globale suivante :

$$Al + sOX \Rightarrow (1 + s)PC \tag{2.23}$$

Les espèces $Al$ et OX sont entièrement consommées au niveau de la flamme et les valeurs à l'infini sont connues car elles sont suivies au cours du calcul. Le nombre de Spalding est donc simplifié :

$$B_M = \frac{Y^+_{Al,s} + Y_{OX,\infty}/s}{1 - Y^+_{Al,s}} \tag{2.24}$$

La fraction massique $Y^+_{Al,s}$ est donnée à partir de la fraction molaire $X^+_{Al,s}$ par :

$$Y^+_{Al,s} = X^+_{Al,s} \frac{\mathcal{M}_{Al}}{\mathcal{M}_{g,s}} \tag{2.25}$$

où $\mathcal{M}_{Al}$ et $\mathcal{M}_{g,s}$ sont les masses molaires de l'aluminium vapeur et celle du gaz à la surface de la goutte. On suppose dans ce modèle que le changement de phase à la surface de la goutte se produit à l'équilibre thermodynamique. En utilisant la pression de vapeur saturante calculée à partir d'une loi semi-empirique de type Rankine déduite de l'hypothèse d'équilibre thermodynamique, nous avons $p_{vs} = p_{atm}\exp(A - B/T_s)$ et donc :

$$X^+_{Al,s} = p_{vs}/p \tag{2.26}$$

Les fractions massiques à la surface de la goutte répondent aux relations suivantes :

$$\frac{1}{\mathcal{M}_{g,s}} = \frac{Y^+_{Al,s}}{\mathcal{M}_{Al}} + \frac{Y^+_{PC,s}}{\mathcal{M}_{PC}}, \quad Y^+_{Al,s} + Y^+_{PC,s} = 1 \tag{2.27}$$

où $\mathcal{M}_{PC}$ est la masse molaire de l'espèce PC. Au final, la fraction massique $Y^+_{Al,s}$ s'écrit :

$$Y^+_{Al,s} = \frac{1}{1 + \frac{\mathcal{M}_{PC}}{\mathcal{M}_{Al}}\frac{1-X^+_{Al,s}}{X^+_{Al,s}}} \tag{2.28}$$

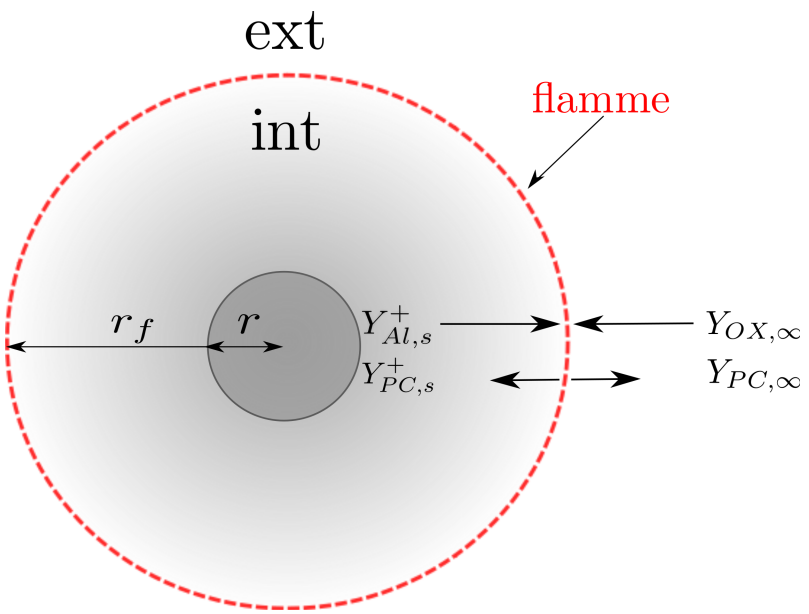


**FIGURE 2.24** – *Schéma de principe du modèle de diffusion*

La détermination du Spalding massique est complète. Il nous reste à déterminer le coefficient de proportionnalité de l'expression du débit massique. Une hypothèse de Lewis unitaire est faite. Comme schématisé en Fig.(2.24), on définit également deux régions situées entre la goutte et la flamme nommée "int" et située à l'extérieur de la flamme nommée "ext". Le débit massique s'exprime alors de la manière suivante :

$$\dot{m}_p = \frac{1}{\frac{r^2}{S}\int_r^{r_f}\frac{c_p}{x^2\lambda}\mathrm{d}x + \frac{r^2}{S}\int_{r_f}^{\infty}\frac{c_p}{x^2\lambda}\mathrm{d}x}\ln(1+B_M) \tag{2.29}$$

où $r_f$ est la distance à laquelle se situe la flamme de diffusion, $c_p$ et $\lambda$ sont respectivement la capacité calorifique massique et la conductivité thermique locales du milieu gazeux correspondant. Des valeurs moyennes notées $\widetilde{(\,.\,)}$ sont choisies pour les régions "int" et "ext" :

$$\dot{m}_p = \frac{S/r}{\left(\widetilde{\frac{c_p}{\lambda}}\right)_{int}\left(1-\frac{r}{r_f}\right) + \left(\widetilde{\frac{c_p}{\lambda}}\right)_{ext}\frac{r}{r_f}}\ln(1+B_M) \tag{2.30}$$

La détermination de la conductivité thermique dans une approche "espèce globale" est particulièrement difficile. Une valeur moyenne $\lambda_{moy}$, préalablement calculée, est donc choisie pour les deux régions. Les capacités calorifiques sont données par :

$$\widetilde{c_p} = \widetilde{Y_i} c_{p,i}(\widetilde{T}) \tag{2.31}$$

Comme la température de la flamme n'est pas connue, la température $\widetilde{T}$ est prise à la température de surface de la goutte qui est une donnée d'entrée. Pour chaque région, on utilise la loi dite du "1/3-2/3" :

$$c_{p,int} = \frac{2}{3} Y^+_{Al,s}\, c_{p,Al}(\widetilde{T}) + \left(\frac{2}{3} Y^+_{PC,s} + \frac{1}{3}\right) c_{p,PC} \tag{2.32}$$

et

$$c_{p,ext} = \frac{1}{3} Y_{OX,\infty}\, c_{p,OX} + \left(\frac{2}{3} + \frac{1}{3} Y_{PC,\infty}\right) c_{p,PC} \tag{2.33}$$

Dans le cas où la surface de la calotte n'est pas pris en compte, le débit massique de la goutte est donc :

$$\dot{m}_p = \frac{4\,\pi\, r\, \lambda_{moy}}{c_{p,int}\ (1 - r/r_f) + c_{p,ext}\, r/r_f}\ \ln(1 + B_M) \tag{2.34}$$

**Modèle de lobe géométrique**
En utilisant les surfaces $S_{al}$ et $S_{ox}$ calculées dans §2.3.3, le débit évaporé corrigé est donc :

$$\dot{m}_p = \frac{2\,\pi\, r\, (2r - h)\, \lambda_{moy}}{c_{p,int}\ (1 - r/r_f) + c_{p,ext}\, r/r_f}\ \ln(1 + B_M) \tag{2.35}$$

Le nombre de Spalding de masse est indépendant de la géométrie [Law, 2006]. Pour ce modèle, on considère que le lobe d'alumine se forme à la surface par réaction hétérogène (cf. §2.1.2) et ne grossit pas en cours de combustion. Des développement importants seraient nécessaires pour prendre en compte une équation de bilan supplémentaire pour la rétrodiffusion d'une espèce alumine ainsi que sa condensation à la surface de la goutte. Le bilan énergétique doit également être revu.

**Utilisation du modèle de diffusion**
Dans le cadre des simulations proposées au cours de cette thèse et utilisant le modèle de diffusion, nous avons que :

- Les gouttes ont déjà chauffées et sont allumées.
- La température des gouttes est égale à la température de saturation et reste constante pendant toute la phase de combustion.
- La masse d'alumine au sein de la goutte est constante et est fixée par la taille du résidu.
- Au début de la combustion, les fractions massiques des espèces OX et PC sont respectivement $Y_{OX} = 1$ et $Y_{PC} = 0$.
- L'élévation de la température du gaz (ou élévation d'énergie $\Delta E_g$) se fait par une modification de la composition du gaz de sorte que :

  $$\Delta E_g = \int_0^{\tau_{comb}} \dot{m}_{tot}(t)\, ((1 + s) h_{PC}(t) - s h_{OX}(t))\, \mathrm{d}t \tag{2.36}$$

  où $h_{PC}$ et $h_{OX}$ sont respectivement les enthalpies des espèces PC et OX. Le terme $\dot{m}_{tot}$ représente le débit évaporé total de l'ensemble des gouttes du spray.

– En fonction des tailles des gouttes initiales, de celle des résidus, de la quantité d'aluminium à brûler, des grandeurs thermophysiques de l'aluminium et d'une température finale de combustion, un calcul d'équilibre OD réalisé avec COPPELIA et combiné avec un algorithme donné dans [Dupays, 2013] permet de déterminer les enthalpies de formation $h^0_{PC}$ et $h^0_{OX}$ des espèces OX et PC, les capacités calorifiques massiques $c_{p,PC}$ et $c_{p,OX}$ ainsi que les masses molaires $\mathcal{M}_{PC}$ et $\mathcal{M}_{OX}$. Le calcul permet aussi de trouver une température initiale pour le gaz. Il est à noter que cette dernière peut être inférieure à celle des gouttes, il n'y a pour autant pas de refroidissement des gouttes.
De plus, ce calcul d'équilibre thermodynamique est compatible avec un brouillard polydisperse. L'équation de bilan, donnée par Eq.(2.23), est alors la même pour toutes les tailles de gouttes.

– A la fin de la combustion, les fractions massiques des espèces sont égales à $Y_{OX} = 0$ et $Y_{PC} = 1$, tout l'aluminium de la goutte est consommé et le diamètre de celle-ci correspond à celui du résidu.

– Le résidu inerte échange de la chaleur avec le gaz (cf. §3.4.1.2) et tend à se mettre en l'équilibre thermique avec ce dernier.

## Conclusion du chapitre 2

Nous avons mis en évidence les conséquences possibles des interactions entre la combustion distribuée des gouttes d'$Al/Al_2O_3$ et l'aéroacoustique de la chambre, et plus globalement sur la dynamique de l'écoulement. La prise en compte de la bicomposition des gouttes et la proposition d'un nouveau modèle de combustion basé sur la diffusion d'espèces globales assurent une meilleure représentativité de la combustion d'une goutte. Même si des améliorations restent à apporter, notamment sur les données thermophysiques du milieu gazeux en conditions de tir, la dynamique des transferts de masse et d'énergie est significativement mieux décrite. De plus, deux paramètres déterminants ont été soulignés pour l'étude de la zone de combustion à savoir : 1- La polydispersion de la phase condensée et son évolution temporelle et spatiale au sein de la chambre. 2- L'importance de l'écoulement gazeux et ses couplages avec les gouttes en combustion et les résidus inertes.
Le chapitre suivant porte donc sur le choix d'un modèle apte à décrire un écoulement diphasique constitué d'une phase dispersée réactive et polydisperse.

# Chapitre 3

# Etat de l'art des modèles pour les écoulements diphasiques à phase dispersée

*Dans un premier temps, nous définissons les écoulements diphasiques à phase dispersée via l'étude de grandeurs et d'échelles caractéristiques. Nous classifions les écoulements communément rencontrés en propulsion solide parmi les différents régimes identifiés dans la littérature sur la base des interactions avec la phase gazeuse ainsi que l'étendue de la polydispersion dans l'espace des phases en taille, en vitesse et en température. Dans une seconde partie, nous proposons un état de l'art des principaux modèles dédiés à l'étude des brouillards de gouttes couplés à une phase gazeuse. Le choix du modèle se structure autour d'un compromis entre le niveau de description spatiale de l'écoulement et des interactions gaz-gouttes et le coût de calcul envisageable pour des simulations industrielles sur des configurations complexes. Dans un troisième temps, nous présentons le choix de la stratégie de modélisation, à savoir une approche cinétique du spray polydisperse couplée à une description fluide de la phase gazeuse. Aussi, nous donnons les équations de conservation régissant la dynamique d'un gaz multi-espèce. Dans la dernière partie, nous exposons les modèles à l'échelle d'une goutte conduisant à la fermeture de l'équation cinétique.*

## 3.1 Description et points clés des écoulements diphasiques

### 3.1.1 Généralités : notion d'écoulements à phases séparées et à phase dispersée

La classification des écoulements diphasiques a fait l'objet de nombreux travaux. Elle diffère selon le point de vue adopté et les caractéristiques mises en avant. Ainsi, on rencontre trois types de classification reposant respectivement sur :

1. Les états de la matière constituant les phases non miscibles de l'écoulement ; plusieurs combinaisons sont possibles : gaz-liquide, gaz-solide, liquide-solide et liquide-liquide. Dans nos cas d'études, nous nous intéressons aux deux premiers.

2. La nature des échanges entre phases : échanges de masse, de quantité de mouvement et de chaleur possibles pour les écoulements réactifs, phénomènes de collision voire de coalescence...

3. L'organisation de l'écoulement décrite par la topologie de chaque phase et de la géométrie des interfaces [Ishii, 1975] :

   – Les écoulements à phases séparées décrits par deux milieux continus délimités par une surface d'échange, aussi appelée interface, de grande échelle dont la géométrie et l'évolution sont complexes à décrire. Il s'agit de jets liquides injectés dans un milieu gazeux, de films liquides présents le long de parois...

– Les écoulements à phase dispersée où l'une des phases se présente sous forme d'éléments de taille très petite par rapport aux échelles de longueurs caractéristiques de l'écoulement du fluide porteur. Il s'agit de bulles dans un liquide ou encore, comme dans cette thèse, de gouttes ou de particules dans un gaz. Finalement, la surface d'échange totale entre les particules/bulles et le milieu continu est particulièrement importante.

– Les écoulements mixtes présentant dans une même région de l'espace des phases séparées et dispersée. C'est la situation rencontrée par exemple dans les configurations moteurs où un jet de carburant liquide est injecté dans le milieu gazeux de la chambre de combustion et s'atomise sous la forme d'un brouillard de gouttes ; on parle d'atomisation primaire et secondaire. Dans le cas des MPS, des écoulements à phases séparées existent si l'on prend en compte la formation du dépôt d'alumine dans le fond arrière.

Dans l'ensemble de cette thèse, on emploie le terme particule de manière générique pour désigner aussi bien des constituants en phase solide ou liquide pouvant interagir avec la phase gazeuse et entre eux. Cependant, le terme goutte sera utilisé dans les parties de la thèse décrivant spécifiquement l'écoulement à l'intérieur de la chambre des MPS où aluminium et alumine sont en phase liquide. La solidification éventuelle des gouttes dans le divergent de la tuyère n'est en effet pas traitée.
Il convient dans un premier temps de caractériser le suivi de l'interface gaz-liquide. Un travail commun réalisé avec Clément Le Touze et portant sur la modélisation du couplage entre une phase séparée et une phase dispersée est présenté dans le chapitre 10. C'est pourquoi nous présentons synthétiquement les modèles couramment employés pour décrire les phases séparées et suivre l'interface.

#### 3.1.1.1 L'approche fluide-fluide DNS et la méthode de suivi d'interface

La modélisation et la simulation des écoulements à phases séparées reposent sur la résolution directe des équations régissant chaque phase ainsi que les conditions d'évolution de l'ensemble des interfaces. Dans certains cas particuliers, aucune modélisation dédiée n'est nécessaire pour décrire l'interface entre deux fluides car elle dépend directement de l'évolution de chacune des phases comme illustré dans [Monaghan, 1992]. Dans la grande majorité des cas, l'étude de la dynamique de l'interface repose sur l'établissement d'une technique de suivi qui satisfait les conditions aux limites entre les deux milieux fluides [Scardovelli and Zaleski, 1999]. Une variété de méthodes a été développée afin de décrire l'évolution de l'interface. D'une part, on trouve les techniques dites explicites de suivi de front ou d'interface, appelées Front-tracking methods [Tryggvason et al., 2001; Popinet and Zaleski, 1999], potentiellement couplées à une méthode de type ghost-fluid [Terashima and Tryggvason, 2009] pour les écoulements compressibles. D'autre part, des méthodes dites implicites ont été développées, au sens où la localisation de l'interface ne fait pas l'objet d'un suivi à l'aide de marqueurs mais est reconstruite à partir de l'approche utilisée et que l'on appelle méthode de capture d'interface du fait de la similarité avec les méthodes d'approximation des discontinuités en dynamique des gaz. Plusieurs classes de méthode sont disponibles :
– les méthodes Level-set [Sussman et al., 1994; Herrmann, 2008; Desjardins et al., 2008] que l'on peut coupler avec une méthode ghost-fluid [Desjardins et al., 2008].
– les méthodes Volume Of Fluid [Rider and Kothe, 1998; Fuster et al., 2009] où l'interface peut être reconstruite à l'aide d'algorithmes géométriques.
– un couplage des deux méthodes utilisant ou non une méthode ghost-fluid [Sussman and Puckett, 2000; Le Chenadec, 2012; Le Chenadec and Pitsch, 2013; Menard et al., 2007] permettant de glaner les avantages des deux approches en termes de conservation et précision.

Ces approches fournissent un suivi spatial particulièrement précis de l'interface mais les contraintes numériques pour chacune de ces méthodes sont fortes et nécessitent le développement d'outils numériques dédiés. Ces approches sont le plus souvent utilisées pour l'étude de l'atomisation primaire [Le Chenadec, 2012; Lebas et al., 2009; Fuster et al., 2009]. Elles sont en constante évolution mais il semble actuellement clair que ces méthodes ne permettent pas de décrire l'ensemble des échelles dans une approche DNS depuis les zones denses jusqu'à l'apparition de la phase dispersée dans des conditions d'injection proche de la réalité en termes de nombres de Weber et de Reynolds [Reitz and Bracco, 1982; Reitz, 1987]. Même si elles sont très utiles à la modélisation et à la compréhension physique dans des configurations académiques, la simulation de l'injection dans une chambre de combustion en conditions réelles nécessite une modélisation d'ordre réduit et le développement de méthodes numériques adaptées.
Une autre approche possible pour la description de ces écoulements à phases séparées repose sur les modèles d'interface diffuse. Ces approches et les méthodes numériques associées ont fait l'objet

d'une large littérature depuis les années 1970, en particulier pour la modélisation des écoulements diphasiques dans les centrales nucléaires. Elles reposent sur des hypothèses de prise de moyenne dont on peut trouver une bibliographie dans [Kah, 2010; Emre, 2014] et ont connu un regain d'intérêt en particulier suite aux travaux de R. Saurel et R. Abgrall [Saurel and Abgrall, 1999]. L'interface peut ou ne peut pas être reconstruite à partir de la connaissance des champs résolus suivant le niveau de modélisation et l'approximation de l'interface peut être plus ou moins grossière. Des travaux récents ont eu lieu sur ce sujet [Le Martelot et al., 2014; Blanchard et al., 2013; Villedieu et al., 2013] ; en particulier, C. Le Touze s'intéresse au couplage entre une phase séparée décrite via une interface diffuse et une phase dispersée dans le contexte de l'atomisation primaire en propulsion liquide [Le Touze, 2015]. Un lien entre ces travaux et les développements de cette thèse est présenté dans le chapitre 10. Ces approches peuvent éventuellement être employées pour décrire des écoulements à phase dispersée [Drui, 2017], même si la description de l'ensemble de la polydispersion et de la dynamique de gouttes inertielles est en général mieux décrite par une approche d'ordre réduite dédiée aux écoulements à phase dispersée sur laquelle nous allons nous concentrer dans la suite.

#### 3.1.1.2 De la phase séparée à la phase dispersée : l'atomisation primaire

Le passage d'un écoulement à phases séparées à un écoulement à phase dispersée a lieu dans le contexte de l'injection liquide dans le cadre de l'atomisation primaire puis secondaire. Cette situation est par exemple rencontrée en propulsion liquide ou dans l'industrie automobile où le carburant est pulvérisé dans la chambre de combustion.

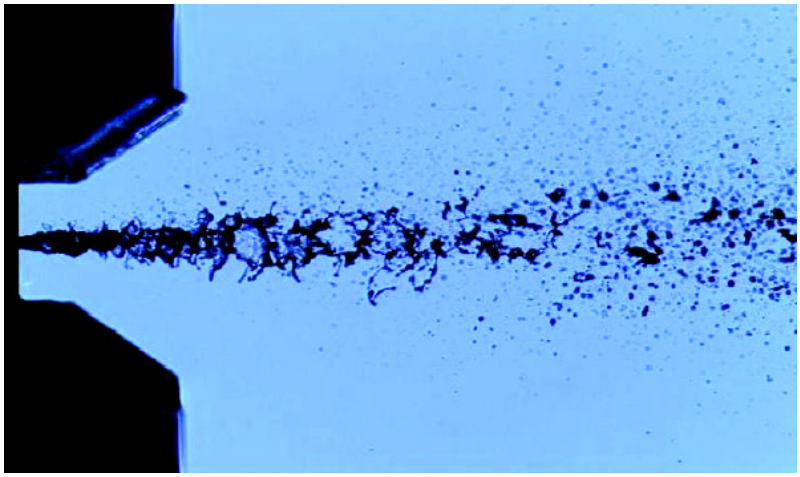

**FIGURE 3.1** – *Visualisation de l'atomisation primaire d'un jet liquide et production d'un spray polydisperse* ©*CORIA/Dumouchel*

Le nombre de Weber est une grandeur sans dimension particulièrement appropriée pour rendre compte de l'équilibre de l'interface. Il met en compétition les forces d'inertie d'une des phases avec la tension superficielle de l'interface $\sigma_{l,g}$. Un nombre de Weber liquide, noté $\mathrm{We}_l$, décrit les modifications de l'interface dues aux forces issues du mouvement du jet liquide :

$$\mathrm{We}_l = \frac{\rho_l \, L \, \|\mathbf{u_l} - \mathbf{u_g}\|^2}{\sigma_{l,g}} \tag{3.1}$$

où $L$ est une longueur caractéristique de l'interface, $\rho_l$ est la masse volumique de la phase liquide et $\mathbf{u_l} - \mathbf{u_g}$ représente l'écart de vitesses entre les deux phases. Le Weber liquide est utilisé plus spécifiquement pour quantifier l'intensité de l'atomisation primaire qui caractérise la transition d'une phase séparée à une phase dispersée [Le Chenadec, 2012; Emre, 2014]. A ce jour, l'étude complète d'un écoulement à phases séparées et d'un écoulement à phase dispersée résultant d'une atomisation primaire n'est pas envisageable au sein d'une même simulation du fait du spectre d'échelles en jeu comme indiqué ci-dessus.
Le coût de l'approche DNS et l'impossibilité de simuler l'ensemble du phénomène d'atomisation en conditions réelles ont conduit à l'utilisation d'un modèle d'ordre réduit et de méthodes numériques associées pour la partie écoulement à phase séparée, mais ces modèles ne permettant pas de décrire la phase dispersée de manière satisfaisante dans l'état actuel des avancées. Il devient nécessaire de coupler deux modèles d'ordre réduit dans diverses zones de l'écoulement comme proposé dans

[Le Touze, 2015]. Ce type d'étude est menée dans divers groupes en ce moment [Devassy et al., 2013; Devassy et al., 2015] mais les critères de transition ne sont pas évident à mettre en place et interfacer deux modèles de nature mathématique aussi différente demande des approfondissements. Ainsi, nous nous intéressons dans les parties suivantes plus spécifiquement à la description des écoulements à phase dispersée. Nous définissons leurs caractéristiques principales ainsi que les régimes d'écoulements rencontrés en propulsion solide.

### 3.1.2 Description des écoulements à phase dispersée et échelles caractéristiques

#### 3.1.2.1 Notions d'échelles et de taux de chargement

Quand on étudie une phase dispersée, la notion d'échelle est déterminante. Notons $d$ la taille caractéristique des particules, $l$ le libre parcours moyen au sein du milieu porteur, $s$ la distance interparticulaire et $L$ la taille caractéristique de l'écoulement.
Nous retenons donc que les écoulements à phase dispersée répondent au critère suivant :

$$l << d << L \tag{3.2}$$

Avant de sérier les différents régimes d'écoulements à phase dispersée, nous définissons deux grandeurs caractéristiques : les fractions volumique et massique de chaque phase. Etablies sur un volume de contrôle, noté $\nu_c$, représentant le volume total occupé par les deux phases, les fractions volumique et massique de la phase dispersée, indicée $p$, sont définies par :

$$\alpha_p = \frac{\nu_p}{\nu_c}, \quad \Phi_p = \frac{\mathrm{M}_p}{\mathrm{M}_c} \tag{3.3}$$

où $\nu_p$ est le volume occupé par la phase dispersée et $\mathrm{M}_p$ et $\mathrm{M}_c$ sont respectivement la masse de la phase dispersée et la masse totale associées au volume de contrôle. Par définition, les fractions volumique et massique de la phase gazeuse sont données respectivement par les relations suivantes : $\alpha_g = 1 - \alpha_p$ et $\Phi_g = 1 - \Phi_p$. Un autre paramètre important pour caractériser le couplage est le rapport des concentrations massiques des gouttes et du gaz, aussi nommé taux de chargement que l'on définit par : $\mu_p = \Phi_p / \Phi_g$.

#### 3.1.2.2 Classification des régimes des écoulements à phase dispersée

Une classification relative aux états de la matière i.e. à la nature des gouttes ou à la nature des échanges entre phases est possible mais il est plus utile de sérier les différents types d'écoulements à phase dispersée en fonction du volume relatif occupé par les particules.
On parle alors d'écoulement dilué pour $\alpha_p < 10^{-3}$, modérément dense pour $10^{-3} < \alpha_p < 10^{-2}$ et dense pour $\alpha_p > 10^{-2}$ [O'Rourke, 1981]. En supposant, en première approximation, que les particules forment un réseau cubique, la fraction volumique peut être reliée à la distance interparticulaire de la manière suivante :

$$\frac{s}{d} = \left(\frac{\pi}{6\alpha_p}\right)^{\frac{1}{3}} \tag{3.4}$$

Pour $\alpha_p = 10^{-1}$ et des gouttes de $1\mu$m, la distance $s$ est environ égale à $1.7\mu$m. Dans ce régime particulièrement dense, les échanges de masse, de quantité de mouvement et d'énergie entre la phase porteuse et une particule sont impactés par les particules voisines. Elles ne peuvent donc pas être traitées comme des éléments isolées.
Dans le cadre des phases dispersées diluées ou modérément denses, la dynamique de l'écoulement diphasique est pilotée par deux mécanismes : les collisions entre particules et les changements de taille, la taille étant un paramètre clé pour décrire l'intensité des échanges entre phases. Pour le premier, le nombre de Knudsen, noté Kn, caractérise l'intensité des collisions entre particules rapporté à un temps de parcours libre de toutes interactions particules-particules [Struchtrup, 2005]. Il se définit par :

$$\mathrm{Kn} = \frac{\tau_{coll}}{\tau_g} \tag{3.5}$$

où $\tau_{coll}$ est le temps caractéristique moyen de collisions ($f_{coll} = 1/\tau_{coll}$, $f_{coll}$ est la fréquence de collisions) et $\tau_g$ est un temps caractéristique de la phase porteuse. La fréquence de collisions est plus élevée quand la concentration volumique des particules est importante. Bien que ce nombre

de Knudsen diffère de celui qui est calculé en théorie cinétique standard pour les gaz, il indique que le taux de collisions n'est plus assez important pour assurer un équilibre thermodynamique local. Pour des valeurs de Kn $< 10^{-2}$, on considère que le milieu constitué par ces particules est un fluide continu. En propulsion solide, les brouillards de gouttes présentent des valeurs de Kn supérieures à $10^{-2}$ ce qui exclut de traiter la phase dispersée avec un modèle fluide "classique" comme les équations d'Euler ou Navier-Stokes. Une hiérarchie des régimes collisionnels est proposé dans [Mathiaud, 2006]. Notons, pour exemple, que pour Kn $= +\infty$ et le régime non collisionnel associé, cela implique que deux brouillards de gouttes se croisent sans qu'ils interagissent entre eux.
Concernant les phénomènes impliquant un changement de taille, il en existe trois principaux pour nos applications, à savoir l'évaporation, la coalescence et la fragmentation. Pour cette dernière on s'intéresse cette fois à l'impact des forces aérodynamiques de la phase gazeuse sur la phase liquide en déterminant un nombre de Weber aérodynamique ou gazeux $\mathrm{We}_g$ défini par :

$$\mathrm{We}_g = \frac{\rho_g \, L \, \|\mathbf{u} - \mathbf{u_g}\|^2}{\sigma_{l,g}} \tag{3.6}$$

où $\rho_g$ est la masse volumique de la phase gazeuse. Ce nombre de Weber caractérise des situations d'atomisation secondaire c'est-à-dire des situations où des gouttes mères vont se fragmenter en des gouttes filles de taille inférieure. On peut établir alors un nombre de Weber critique en deçà duquel la goutte ne se fragmente pas. Ce nombre critique est de l'ordre de 12.

#### 3.1.2.3 Interactions avec la phase gazeuse : notion de couplage fort ou "two-way coupling" et impact de la polydispersion en taille

La taille des particules est un paramètre clé pour définir la nature de l'écoulement au vu des rapports d'échelles spatiales. Elle conditionne également la dynamique de l'écoulement via les temps caractéristiques des particules. Ces derniers correspondent aux temps de réponse d'une particule à une fluctuation du gaz. Nous définissons le temps de relaxation dynamique $\tau_u$ qui caractérise le temps de mise en équilibre de la vitesse de la particule par rapport à celle du gaz. De même, un temps de relaxation thermique $\tau_T$ est introduit. Un temps caractéristique pour l'évaporation de la goutte $\tau_m$ peut aussi être défini. Ces temps caractéristiques dépendent fortement de la taille de la particule et leurs expressions sont données §3.4. Cette dépendance en taille se conçoit aisément via la surface d'échange entre la particule et le gaz pour les transferts de masse et de chaleur ou encore la section de référence (maître-couple) vue par l'écoulement dont est tirée l'expression de la force de traînée.
Le nombre de Stokes est un paramètre important pour qualifier le comportement des particules au sein de l'écoulement. Le nombre de Stokes dynamique de la particule est donné par :

$$\mathrm{St_u} = \frac{\tau_u}{\tau_g} \tag{3.7}$$

où $\tau_g$ représente un temps caractéristique de la phase gazeuse lié à une variation de vitesse par exemple. Nous introduisons le nombre de Stokes thermique $\mathrm{St_T}$ qui est défini par :

$$\mathrm{St_T} = \frac{\tau_T}{\tau_g} \tag{3.8}$$

Dans la suite de ce travail, nous utilisons souvent St pour désigner le nombre de Stokes dynamique. Pour St $<< 1$, les particules réagissent instantanément aux variations du gaz. Les écarts de vitesse entre la particule et le gaz sont infimes. Pour St $>> 1$, la particule est peu affectée par l'écoulement. Comme illustré en Fig.(3.2), les trajectoires des particules au sein des structures tourbillonnaires sont très différentes en fonction de la valeur du nombre de Stokes.
L'étude des écoulements diphasiques repose sur l'analyse des interactions entre phases, appelée couplage. Ce dernier se caractérise par des échanges de masse, de quantité de mouvement et d'énergie entre des particules inertes et le gaz.
La première catégorie d'échanges résulte de la force de traînée appliquée sur les particules par l'écoulement gazeux ; la seconde est due aux différents modes de transferts de chaleur. Des transferts d'énergies cinétique et thermique sont alors pris en compte. Le gaz, qui est vu comme une phase porteuse, affecte donc les particules constituant la phase dispersée mais ces dernières n'impactent pas forcément la phase gazeuse. Dans ce cas, on parle de couplage faible ou "one-way coupling" en anglais. Quand la rétroaction des particules influence significativement l'environnement gazeux, on parle de couplage fort ou "two-way coupling" en anglais. Il n'y a pas de transition marquée

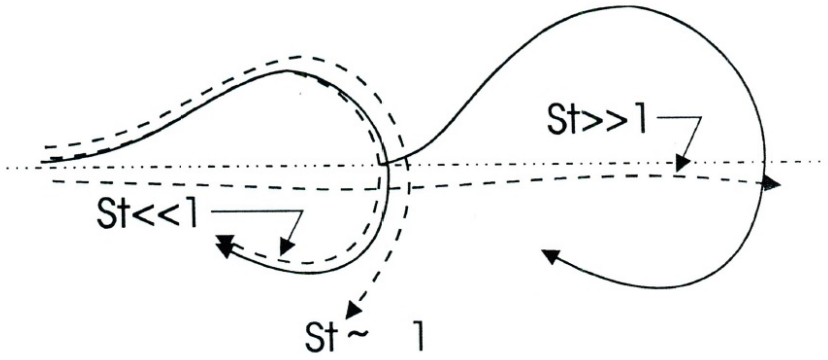


**FIGURE 3.2** – *Trajectoires des particules fonction de leur nombre de Stokes St au sein de structures tourbillonnaires se développant au niveau d'une couche de mélange [Crowe et al., 1998]*

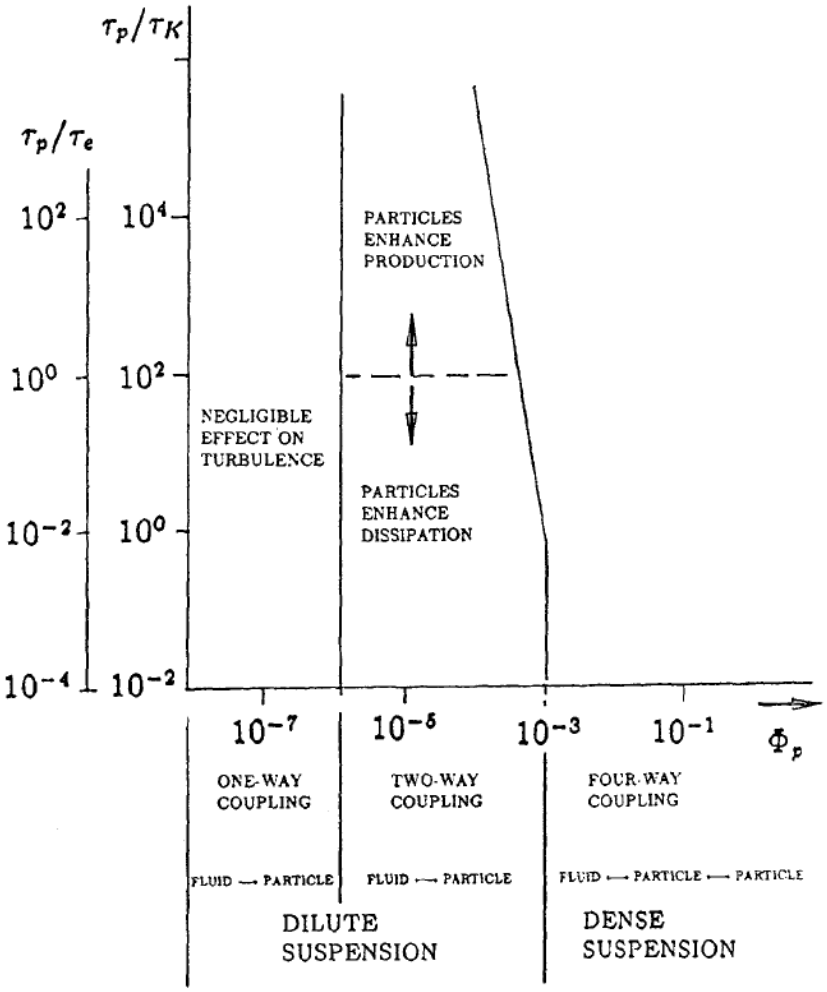


**FIGURE 3.3** – *Carte des régimes des interactions entre le spray et le gaz en fonction de la fraction volumique de la phase dispersée pour décrire le couplage de la quantité de mouvement [Elghobashi, 1994]*

entre ces deux régimes. La Fig.(3.3) relative à une classification des écoulements à phase dispersée proposée dans [Elghobashi, 1994] fixe un seuil entre couplages faible et fort entre $\alpha_p = 10^{-6} - 10^{-5}$, au-delà de $\alpha_p \approx 10^{-3}$ les écoulements sont caractérisés par des interactions fortes entre particules, on parle alors de "four-way coupling". Notons qu'une classification plus récente présentée dans [Balachandar and Eaton, 2010] confirme ces valeurs seuils.
Les valeurs de fraction volumique pour la phase dispersée peuvent sembler faibles même pour les cas de couplage fort. Aussi, il est plus judicieux d'étudier la fraction massique plus représentative de la rétroaction des particules sur l'écoulement gazeux. En effet, le rapport des masses volumiques du gaz et du liquide a un ordre de grandeur d'environ $10^3$. Ainsi, la fraction massique des configurations

two-way coupling est $\Phi_p > 10^{-3}$. La valeur $\Phi_p = 1$ exprime donc une contribution équivalente de la phase gazeuse sur la phase dispersée et réciproquement. Les situations de two-way coupling sont finalement difficiles à étudier. En effet, dans ces régimes d'écoulements, une particule impacte de manière isolée le gaz environnant mais ce dernier est modifié par l'ensemble des constituants de la phase dispersée. Les particules ont donc une action indirecte entre elles via la rétroaction du gaz. Ces interactions complexes dépendent en particulier de la taille des particules.
Un paramètre de couplage sur l'échange de quantité de mouvement a été introduit dans [Crowe et al., 1998] et relie le nombre de Stokes au taux de chargement :

$$\Pi_u = \frac{\mu_p}{\mathrm{St_u}} \left(1 - \frac{u}{u_g}\right) \tag{3.9}$$

où $u$ et $u_g$ sont respectivement les vitesses de la particule et du gaz dans un contexte monodimensionnel. Quand le nombre de Stokes tend vers zéro, on vérifie que la vitesse de la particule est infiniment proche de celle du gaz. Notons aussi que le couplage est proportionnel au taux de chargement. De même, un paramètre de couplage relatif à l'échange d'énergie est défini par :

$$\Pi_T = \frac{\mu_p}{\mathrm{St_T}} \left(1 - \frac{T}{T_g}\right) \tag{3.10}$$

où $T$ et $T_g$ sont respectivement les températures de la particule et du gaz.

#### 3.1.2.4 Notion de polydispersion en vitesse et croisements de trajectoires

Dans le paragraphe précédent, nous avons mis en évidence que la taille des particules jouait un rôle important sur le comportement de ces dernières au sein des structures hydrodynamiques de l'écoulement. Les écarts de vitesse entre certaines tailles de particules et le gaz nous amènent à sérier différents régimes d'écoulement corrélant les variables taille/vitesse. A cet effet, dans le contexte d'étude des tourbillons de Taylor-Green, un nombre de Stokes critique $\mathrm{St_{crit}}$ est défini dans [de Chaisemartin, 2009; Massot et al., 2009] par $\mathrm{St_{crit}} = 1/(2\pi n_d)$ où $n_d$ est le nombre de dimensions d'espace et $1/2\pi$ est le taux d'étirement maximal (gradient de vitesse en 1D). Donné dans le Tab.(3.1), le rapport $\mathrm{St/St_{crit}}$ détermine le régime inertiel des particules.

**TABLE 3.1** – *Régimes inertiels des particules*

| Régimes | $\mathrm{St/St_{crit}}$ |
|---|---|
| Traceurs | $<< 1$ |
| Peu inertielles | $< 1$ |
| Modérément inertielles | $\approx 1$ |
| Inertielles | $> 1$ |

Selon le régime, il peut apparaître un phénomène de croisement de trajectoires de particules, appelé Particle Trajectory Crossing en anglais (PTC pour l'acronyme). Ce dernier caractérise la possibilité de trouver des particules de vitesses différentes dans une même région de l'écoulement. En fonction du nombre de Knudsen, et en particulier de la taille et de la concentration volumique des particules, des situations de collisions ou encore de coalescence apparaissent.
La Fig.(3.4) illustre les dynamiques possibles au sein d'un écoulement à phase dispersée en termes de polydispersion en taille et en vitesse selon le rapport $\mathrm{St/St_{crit}}$. Pour un spray composé uniquement de particules peu ou non inertielles, nous avons :

1. Une dérive en vitesse très faible par rapport à celle du gaz.
2. Un régime dit monocinétique telle que la dispersion en vitesse pour une taille de particule donnée est mineure.

Pour des particules modérément inertielles ou inertielles, on parle de régime polycinétique. La dispersion en vitesse est significative pour une même taille dans une même région de l'espace.
Pour un spray mêlant toutes tailles de particules, nous avons : 1- des croisements possibles de particules de tailles différentes, nommés dans ce cas précis "hetero-PTC". 2- des croisements entre particules inertielles d'une même taille, il s'agit alors de cas "homo-PTC".
A la notion de dispersion en vitesse s'ajoute celle des échelles spatiales sur lesquelles ont lieu les interactions entre particules et avec le gaz. Pour des particules modérément inertielles, leurs croisements se produisent sur des petites distances dues à des fluctuations locales du gaz générées suivant par exemple les petites échelles de la turbulence [Massot, 2007; Chalons et al., 2015]. Il

s'agit de croisements à petites échelles ou encore small scale PTC. Ces derniers sont à différencier des croisements à grandes échelles, large scale PTC, pour lesquelles les variations de vitesse se poursuivent sur des distances importantes après le croisement. Cette catégorie concerne principalement les particules inertielles ou très inertielles. Ces particules suivent l'écoulement global et ne sont pas sensibles aux fluctuations rapides de ce dernier. Dans le cas d'un MPS, ces particules sont entraînées du fond avant vers la tuyère pour finalement être éjectées (en excluant le cas où elles sont emprisonnées dans la zone de recirculation du fond arrière comme par exemple pour le moteur P230). Elles possèdent cependant suffisamment d'inertie pour se croiser au niveau de l'axe de symétrie du moteur.

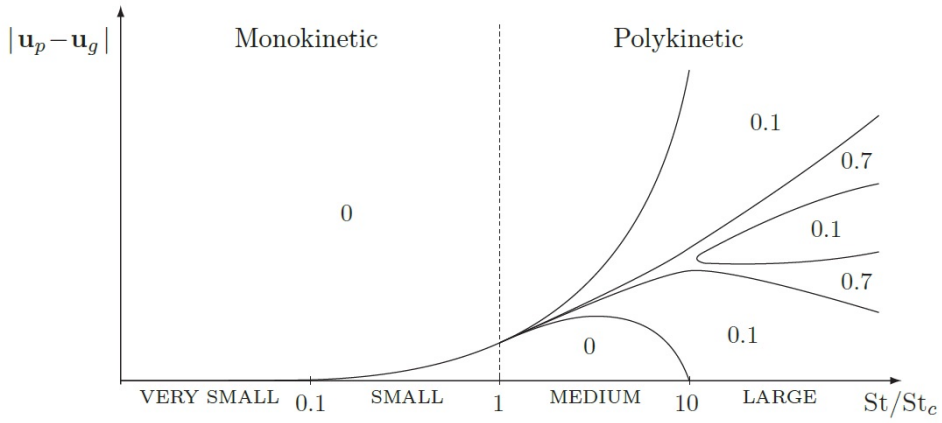


**FIGURE 3.4** – *Régimes d'écoulements d'une phase dispersée* ©*Doisneau*

Dans les MPS, les PTC surviennent dans différentes régions du moteur. L'évolution en taille des particules au sein de la chambre ainsi que les fortes variations de vitesse du gaz dans la tuyère introduisent une grande diversité des régimes rencontrées (small ou large scale PTC) et des phénomènes tels que les collisions et la coalescence. On propose dans le paragraphe suivant d'illustrer cette variété de régimes et de positionner cette thèse en ciblant les situations qui font l'objet de développements.

#### 3.1.2.5 Régimes rencontrés en propulsion solide

Le schéma proposé en Fig.(3.5) illustre pour différentes zones du moteur les grandeurs caractéristiques de la phase dispersée en termes de fraction volumique, de temps de relaxation et de combustion ainsi que de nombres adimensionnés.
Très proche de la surface du propergol (de l'ordre du mm), les valeurs de $\alpha_p$ et $\Phi_p$ sont représentatives d'un écoulement dense avec un taux d'occupation volumique des particules particulièrement élevé, supérieur à $10^{-3}$ et même de l'ordre de $10^{-1}$ à la surface du propergol. Comme évoqué dans §3.1.2.3, l'influence d'une particule sur la dynamique d'une particule voisine via la modification du champ gazeux est envisageable. La fraction volumique de la phase condensée étant particulièrement élevée dans cette zone, il se pose la question des phénomènes de collisions et de coalescence. En première approximation, nous les négligeons en supposant que le flux de masse des gouttes en combustion dirigé de la surface de la gouttes vers le milieu gazeux prévient tout rapprochement entre les particules.
En quittant la surface du propergol (au delà du mm), les valeurs des fractions volumiques diminuent de façon conséquente pour atteindre un régime de phase dispersée peu dense à modérément dense. Deux phénomènes entrent en jeu, nous les détaillons pour le cas du moteur P230 :

1. La diminution de la taille liée à la combustion. Pour les agglomérats de 120$\mu$m, le temps de relaxation dynamique est proche de $8.10^{-4}$s et leur temps de combustion de l'ordre de $10^{-2}$s. En supposant une vitesse d'entraînement moyenne de quelques mètres par seconde, l'épaisseur de la zone de combustion des agglomérats est comprise entre 1 et 10 centimètres. Pour les gouttes isolées de 30$\mu$m, le temps de relaxation est proche de $5.10^{-5}$s et leur temps de combustion de l'ordre de $10^{-4}$s. En supposant une vitesse d'entraînement moyenne de quelques mètres par seconde (cependant supérieure aux agglomérats car elles sont moins inertielles), l'épaisseur de la zone de combustion des gouttes isolées est comprise entre 0.1 et 1 centimètre. Les résidus de 60$\mu$m issus des agglomérats ont un temps de relaxation de l'ordre de $4.10^{-4}$s. Cette valeur est obtenue en considérant un rapport 2 entre la taille initiale

de l'agglomérat et celle du résidu mais aussi, en supposant en première approximation, un rapport 2 entre la masse volumique de l'alumine liquide par rapport à celle de l'aluminium. Pour les gouttes isolées et leurs résidus de $3\mu$m, le rapport de leurs diamètres est égal à 10. En considérant le facteur 2 sur les masses volumiques initiale et finale, le rapport du temps de relaxation de la goutte isolée sur celui du résidu est de 50 soit $10^{-6}$s.

2. La dispersion des gouttes au sein de la chambre entraînant une dilution de la phase dispersée modulée ensuite par une éventuelle répartition préférentielle des particules dans la chambre suivant leur taille comme observé en présence de structures tourbillonnaires (cf. §3.1.2.3). Des concentrations fortes de particules peuvent ainsi apparaître en périphérie des tourbillons. Pour les résidus de $60\mu$m, on évalue dans la chambre un nombre de Stokes de l'ordre de $10^{-2}$ en prenant un temps caractéristique de la phase gazeux proche de $5.10^{-2}$s (basé sur le temps de rotation des grandes structures tourbillonnaires). Pour les résidus de $3\mu$m, on évalue un nombre de Stokes inférieur à $10^{-4}$.

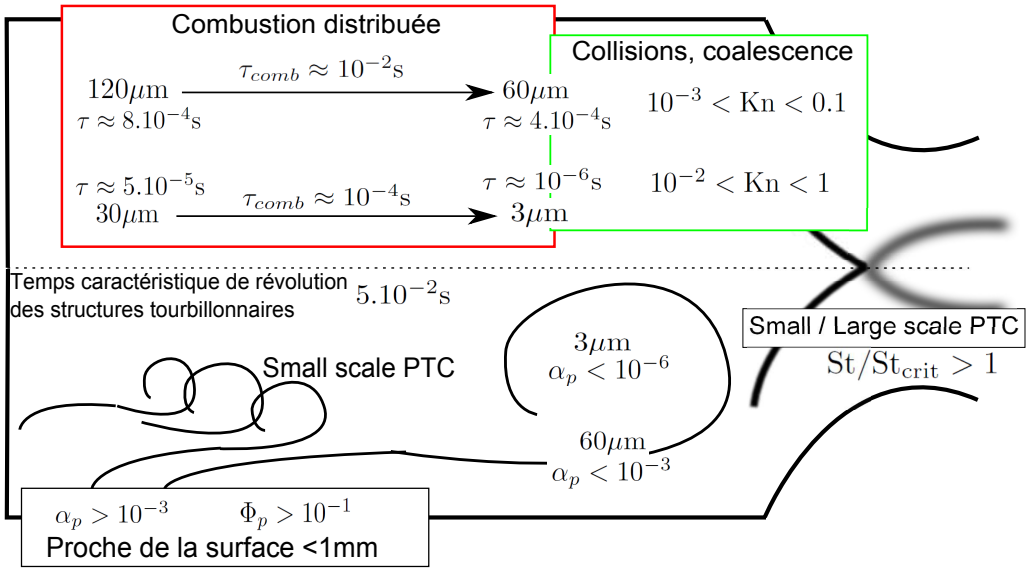


**FIGURE 3.5** – *Grandeurs caractéristiques de la phase dispersée au sein d'un moteur à propergol solide, exemple du P230*

Des phénomènes de PTC à petite échelle surviennent au sein de la chambre où des structures tourbillonnaires/turbulentes se créent [Dupif et al., 2015b; Simoes, 2006]. L'écoulement gazeux présente également des zones d'étirement impactant la fraction volumique des gouttes en fonction de leur inertie. La première de ces zones correspond aux structures hydrodynamiques ; les résidus de $60\mu$m présentant les nombres de Stokes les plus élevés tendent à se positionner préférentiellement en périphérie des tourbillons. On estime une fraction volumique proche de l'ordre de $10^{-4} - 10^{-3}$. Les résidus de $3\mu$m se répartissent au centre des structures ; la fraction volumique est environ $10^{-6}$. Les phénomènes de collision et de coalescence peuvent être caractérisés par le nombre de Knudsen (cf. §3.1.2.2). Ils sont respectivement de l'ordre de 0.1 et 1 dans la chambre pour les résidus de $60\mu$m et $3\mu$m. Notons qu'il est plus élevé pour les petits résidus que pour les résidus de taille importante. Les nombres de Knudsen diminuent dans la tuyère ainsi que la concentration volumique de la phase dispersée qui décroît de manière significative (d'un facteur 100) car l'écoulement est accéléré, diminuant alors les collisions entre les particules. La coalescence se produit majoritairement dans la chambre, et préférentiellement dans le convergent où l'on trouve des nombres de Knudsen inférieur à 1 et des concentrations volumiques suffisamment élevées. Une caractérisation plus détaillée des phénomènes de coalescence et de collisions et de leur modélisation est présentée dans [Doisneau, 2013].

Les scénarios de large scale PTC sont essentiellement observés pour les particules les plus inertielles. Ces croisements se situent principalement au niveau de l'axe de symétrie du moteur. Ils concernent les résidus d'alumine présentant un rapport $\mathrm{St/St_{crit}}$ supérieur ou de l'ordre de 1. Dans la chambre, le Stokes critique est de l'ordre de $5.10^{-2}$ en se basant sur le taux d'étirement présenté dans §3.1.2.4 pour les tourbillons de Taylor-Green. Les résidus de $60\mu$m ne répondent pas à ce critère. Les éventuelles particules d'alumine obtenues par coalescence et caractérisées par un diamètre supérieur à $120\mu$m sont suffisamment inertielles. Dans la tuyère, il n'est cependant pas possible de reprendre le Stokes critique utilisé dans la chambre. En effet, les hypothèses utilisées pour le

calcul du taux d'étirement maximal, à savoir une vitesse initiale nulle pour les particules et une structure tourbillonnaire, ne s'appliquent pas à l'écoulement au sein de la tuyère. Une étude plus poussée est donc nécessaire pour déterminer un gradient de vitesse maximal dans une direction.

## 3.2 Modélisation des écoulements à phase dispersée

Le choix d'une modélisation repose essentiellement sur le niveau de détails et les échelles spatiales au niveau desquelles se produisent les phénomènes à observer. A cela s'ajoute le coût de la simulation lié au choix de la méthode associée à un modèle donné. Ainsi, cela exclut immédiatement l'étude des échelles moléculaires pour nos applications. Pour des échelles supérieures, le formalisme de la mécanique des milieux continus est envisageable et permet de dériver des équations de conservation décrivant les évolutions temporelle et spatiale de grandeurs macroscopiques représentatives du problème, aussi appelées les observables du système. Le niveau de précision dépend du filtrage spatial utilisé pour décrire les différentes phases de l'écoulement. Dans un premier temps, nous présentons ici les approches offrant le maximum de détails. Ce sont les "approches directes" et de "suivi de particules discrètes". Ensuite, nous introduisons la description statistique appliquée à un spray et nous définissons dans quelle mesure une approche cinétique est pertinente dans le cadre de nos études.

### 3.2.1 L'approche directe à l'échelle de la particule

A l'échelle interfaciale, une phase dispersée évoluant dans un milieu porteur est la juxtaposition de domaines monophasiques. Ainsi, des modèles fluides peuvent être employés au sein des différentes phases et il est envisageable de résoudre les plus petites échelles au sein de ces dernières. Ces approches entrent dans la catégorie des modèles dits "full DNS" ou encore "Fully Resolved Simulation" et sont notamment utilisées dans [Apte et al., 2009; Shardt and Derksen, 2012]. Différentes méthodes ont été développées afin de décrire au mieux les interactions entre les deux milieux.
Dans l'approche directe, on propose une résolution DNS du fluide porteur autour de particules solides. Ces particules sont considérées comme des solides indéformables (solid bodies pour le terme anglais) qui évoluent dans l'écoulement en fonction des forces appliquées par le fluide porteur. Cette modélisation s'applique aux particules solides [Apte et al., 2009] mais aussi aux phases dispersées constituées de gouttes présentant des nombres de Weber $We_g$ inférieurs à 12 ce qui exclut les cas de fragmentation secondaire. Les conditions aux limites appliquées sur ces solides conduisent à l'utilisation de différentes techniques : les frontières sont soit finement maillées soit ne coïncident pas avec le maillage comme c'est le cas avec la méthode d'interface immergée [Xu and Subramaniam, 2010].
Cette approche est intéressante pour rendre compte des interactions complexes générées par le regroupement de particules dans une région réduite de l'écoulement. En effet, les particules impactent le fluide qui les entoure mais la faible distance qui les sépare fait qu'elles agissent indirectement sur leurs voisines, on parle d'effets de groupe [Derksen, 2012]. Ce régime d'écoulement correspond aux études de phases dispersées denses rencontrées également pour la sédimentation [Tory et al., 1999]. Ces effets sont également notables pour d'autres situations comme une combustion où la structure de flamme dépend de l'organisation du brouillard de gouttes et de son évolution [Sirignano, 2010] : ce sont des cas particuliers de combustion de groupe. La résolution DNS des plus petites échelles du fluide porteur est incontournable pour traduire à l'échelle macroscopique des phénomènes d'écoulements denses, ces interactions ne pouvant être rendues par l'emploi de modèles à l'échelle d'une goutte isolée [Capecelatro et al., 2014].
Dans le contexte spécifique de la propulsion solide, cette approche semble idéale pour l'étude de l'écoulement dense proche de la surface du propergol, en particulier pour décrire la phase d'entraînement des particules et éventuellement les phénomènes d'agglomération. L'emploi de cette approche à l'échelle d'un moteur n'est actuellement pas accessible car les coûts de calcul avec une résolution DNS sont extrêmement élevés mais elle est pourtant nécessaire pour l'étude des conditions aux limites. Notons que ce coût est linéairement proportionnel au nombre de particules. Les approches DNS trouvent donc un intérêt pour des simulations dont le cadre spatial est restreint comme l'étude de la zone proche paroi. Ces simulations pourraient être employées par exemple pour établir des lois de parois diphasiques pour l'injection gaz-gouttes dans les MPS.

### 3.2.2 Le suivi de particules discrètes : la méthode DPS

La simulation de particules discrètes (ou Lagrangian Discrete Particle Simulation en anglais) est une approche déterministe lagrangienne de la phase dispersée [Riley and Patterson, 1974; Zhu et al., 2007] qui se rapproche de la résolution DNS présentée dans §3.2.1. Elle diffère sur deux points essentiels : 1- l'effet d'occupation volumique des particules n'est plus pris en compte dans les couplages avec le gaz mais il est toujours considéré pour modéliser les collisions 2- les interactions avec le milieu environnant sont établies à partir de modèles de particules vues comme des points

isolés (ou point particles en anglais) [Pai and Subramaniam, 2012]. Cela signifie que la position et l'évolution des propriétés internes de la particule peuvent être résolues exactement par des équations différentielles ordinaires (ODE pour l'acronyme anglais et EDO en français) classiquement utilisées en mécanique du point. Les EDO appliquées au centre de masse $\mathbf{x}_{pi}$ de la particule $i$ prise au sein d'un ensemble $\mathrm{N_p}$ d'autres particules décrivent l'évolution de sa vitesse $\mathbf{u}_{pi}$, de sa taille $S_{pi}$ et de sa température $T_{pi}$ :

$$\partial_t \mathbf{x}_{pi} = \mathbf{u}_{pi}, \quad \partial_t \mathbf{u}_{pi} = \mathbf{F}_{pi}, \quad \partial_t S_{pi} = K_{pi}, \quad \partial_t T_{pi} = H_{pi} \tag{3.11}$$

où $\mathbf{F}_{pi}$, $H_{pi}$ et $K_{pi}$ sont respectivement les termes d'échange de quantité de mouvement et de chaleur ainsi que le taux de variation de la taille due par exemple à l'évaporation. Ces termes d'évolution sont établis à partir des conditions locales du gaz $\rho_g$, $\mathbf{u_g}$ et $T_g$ et de sa composition évaluées à partir de la position et des propriétés de la particule :

$$\begin{aligned} &\mathbf{F}_{pi} = \mathbf{F}(\mathbf{u}_{pi}, S_{pi}, \mathbf{u_g}(t, \mathbf{x}_{pi})), \quad H_{pi} = H(\mathbf{u}_{pi}, T_{pi}, S_{pi}, \mathbf{u_g}(t, \mathbf{x}_{pi}), T_g(t, \mathbf{x}_{pi})) \\ &K_{pi} = K(\mathbf{u}_{pi}, T_{pi}, S_{pi}, \mathbf{u_g}(t, \mathbf{x}_{pi}), T_g(t, \mathbf{x}_{pi})) \end{aligned} \tag{3.12}$$

Les échanges de masse, de quantité de mouvement et d'énergie avec la phase gazeuse sont exprimés au travers des termes sources comme illustré dans l'Eq.(3.30) qui décrit de façon eulérienne le gaz en utilisant le système d'équations de conservation de Navier-Stokes. La méthode DPS est particulièrement adaptée pour les écoulements dilués et modérément denses pour lesquels l'occupation volumique est négligeable. Le traitement des interactions entre particules (collisions, coalescence) est possible et se fait grâce à des méthodes numériques dédiées [Thomine, 2011]. Ces interactions ont également été étudiées dans le cadre des écoulements turbulents [Fede and Simonin, 2006; Wunsch, 2009].

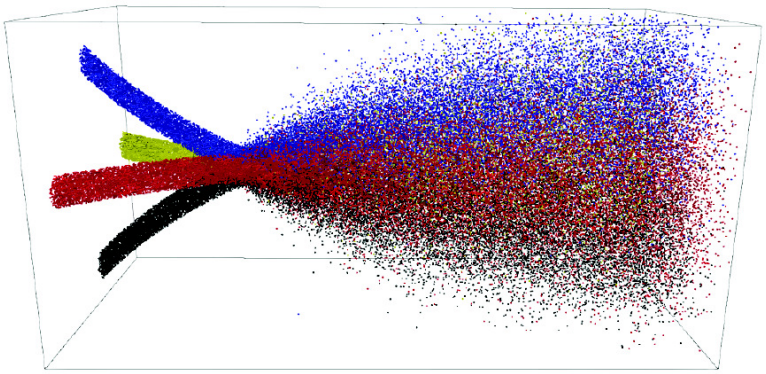

**FIGURE 3.6** – *Simulation DPS d'un croisement de quatre jets de particules avec prise en compte d'un modèle de collision élastique [Thomine, 2011]*

Les premières simulations DPS concernaient l'étude de la dispersion de particules solides inertes [Squires and Eaton, 1991] mais le cadre d'étude a été étendu au cas des gouttes en évaporation dans des écoulements turbulents [Mashayek et al., 1997; Reveillon et al., 1998]. Finalement, la méthode a été utilisée pour des cas de combustion de gouttes [Miller and Bellan, 2000; Reveillon and Vervisch, 2005] et de coalescence [Wunsch, 2009]. Les simulations DPS réalisées avec une approche DNS de la phase gazeuse fournissent un niveau de détails élevé mais comme cela a été évoqué dans §3.2.1, le coût calcul d'une résolution DNS est rédhibitoire pour des configurations industrielles. Des modélisations RANS ou LES (acronymes pour Reynolds-Averaged Navier-Stokes et Large Eddy Simulation) lui sont préférées. L'approche lagrangienne déterministe reste cependant une approche coûteuse quand un grand nombre de particules doit être suivi dans un domaine spatial très grand comme cela est le cas pour un MPS. A titre d'exemple, un système d'équations pour des particules, où seules la position et la vitesse sont suivies, possède un nombre de degrés de liberté égale à $6\mathrm{N_p}$. Le degré de liberté représente pour une particule la possibilité d'évolution temporelle d'une de ses propriétés physiques, par exemple la vitesse qui peut subir des changements dans trois directions d'espace dans le cas 3D. On parle d'espace des phases pour décrire l'espace dans lequel évolue les variables/grandeurs caractéristiques de la particule.
Une approche appelée approche lagrangienne stochastique [Dukowicz, 1980; O'Rourke, 1981] est une alternative intéressante. Dans cette approche, on utilise une particule numérique (parcel en anglais) pour représenter plusieurs particules physiques ce qui réduit significativement le coût

calcul ; cette particule numérique est nommée Stochastic Parcel (SP) dans [O'Rourke, 1981]. Plus de détails sont donnés dans §4.1.1.2.
La simulation de particules discrètes n'est pas l'approche choisie dans cette thèse. L'autre stratégie possible pour décrire un spray est l'approche cinétique qui repose sur une modélisation statistique de la phase dispersée.

### 3.2.3 Description statistique du spray et approche cinétique : pertinence dans le contexte d'étude d'un MPS

Le nombre de degrés de liberté qu'implique le suivi de toutes les particules composant un spray est particulièrement élevé et inaccessible pour des calculs industriels. La description statistique permet d'établir sur un grand nombre de particules des moyennes d'ensemble de propriétés microscopiques. Alors que l'approche déterministe ne correspond qu'à une seule réalisation possible, l'approche statistique caractérise une multitude de réalisations au travers de variables macroscopiques représentatives. Il s'agit donc d'un changement d'échelle qui est pertinent à conditions que le nombre d'ensembles soit suffisamment important [Pottier, 2007]. D'un point de vue statistique, l'ensemble des réalisations possibles pour les $\mathrm{N_p}$ particules du spray peuvent être décrits par une densité de probabilité dite jointe ou à $\mathrm{N_p}$ corps $f^{\mathrm{N_p}}(t, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, ..., \mathbf{x}_{\mathrm{N_p}}, \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, ..., \mathbf{u}_{\mathrm{N_p}})$ ; cette fonction est positive et normalisée. On peut montrer que l'état statistique d'un système à $\mathrm{N_p}$ corps peut être entièrement décrit par un ensemble de fonctions plus simples définies sur un espace des phases réduit, à savoir la fonction de distribution réduite à 1 corps $f^1(t, \mathbf{x}_1, \mathbf{u}_1)$ et un ensemble de fonctions de corrélations décrivant les interactions éventuelles entre les particules [Balescu, 1997]. En l'absence d'interactions, l'état statistique est entièrement décrit par la fonction de distribution réduite à 1 corps dont la somme sur les $\mathrm{N_p}$ corps est appelée NDF notée $f$ dans la suite du document. Elle est positive mais non normalisée.
Le choix d'une approche cinétique associée à une modélisation non DNS du gaz semble particulièrement adaptée pour l'étude de la phase dispersée dans les MPS car les régimes d'écoulements rencontrés sont dans une grande majorité des cas dilués ou modérément denses.
Une des principales limites de cette stratégie est celle de la zone très proche paroi. Dans notre contribution, les gouttes sont représentées par des points isolés qui échangent de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie avec une phase gazeuse continue. Au delà de l'hypothèse de particule ponctuelle, nous supposons que les échanges de masse, quantité de mouvement et d'énergie sont localisés dans l'espace physique et n'impliquent donc que les variables du gaz au point où se trouve la particule ; tout se passe comme si la particule était isolée et la modélisation n'implique pas de corrélation en deux points de la distribution de particules, voire au moins une dépendance des termes d'échange dans la densité de particules par unité de volume. Cette hypothèse, clairement non vérifiée pour des problèmes de sédimentation pour une concentration en particules relativement élevée [Batchelor, 1972], est certainement valable proche de la paroi des MPS dans la zone de combustion où la fraction volumique ne dépasse pas $10^{-1}$ menant à une distance interparticulaire supérieure à $100\mu$m.
Par contre, dans cette région, l'écoulement est modérément dense ce qui conduit à de fortes variations d'une réalisation à l'autre des conditions aux limites. Des fluctuations à petite échelle générées par la combustion des particules peuvent se produire et avoir un impact sur l'écoulement à grande échelle. Cette dynamique observée dans [Zamansky et al., 2014] semble être bien résolue par une approche lagrangienne pour laquelle une échelle de l'interaction gaz-particule a été fixée, comme dans [Capecelatro and Desjardins, 2013]. Cependant, la question de la dépendance de la dynamique dans les conditions initiales ou au bord doit être précisée. Cela signifie que l'on a besoin de la statistique de frontière en moyenne mais aussi des fluctuations autour de cette statistique et de leur propriétés, ce qui est difficile à obtenir dans le cadre d'un MPS.
Nous faisons donc l'hypothèse qu'une description en moyenne est suffisante i.e. l'influence des fluctuations à petite échelle près de la paroi ne conduit pas au développement de structures à grande échelle au sein de la chambre. Cette hypothèse devrait être vérifiée mais elle est faite ici par défaut. Il s'agit donc d'une limite de l'approche cinétique. Nous supposons dans le cadre de cette thèse que ces phénomènes propres aux écoulements modérément denses peuvent être négligés. Comme évoqué dans §3.2.1, une approche DNS sur des configurations de combustion de gouttes d'aluminium à la surface du propergol nous rassurerait dans ce choix.
Dans l'optique d'une simulation complète d'un MPS, une modélisation classique de la phase gazeuse (cf. §3.3.2) couplée à une approche cinétique de la phase dispersée, qui présente un formalisme commode pour traiter la combustion ou la coalescence, semble être le compromis idéal pour évaluer les interactions gaz-particules dans le contexte de futures simulations industrielles à grande échelle. Dans notre étude, le spray est constitué de gouttes de plusieurs tailles caractérisées par un en-

semble fini de propriétés globales : la taille, la température et la vitesse du centre de masse. Cette phase polydisperse est alors décrite par une fonction de densité en nombre $f$ où la quantité $f(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}, T, S)\mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{u}\mathrm{d}T\mathrm{d}S$ représente le nombre moyen de particules à un instant $t$, au voisinage $\mathrm{d}\mathbf{x}$ de la position $\mathbf{x}$, au voisinage $\mathrm{d}\mathbf{u}\mathrm{d}T\mathrm{d}S$ de la vitesse $\mathbf{u}$, de la température $T$ et pour une surface $S$. En théorie cinétique des gaz, la température représente l'énergie cinétique moyenne des molécules. Ici, ce n'est pas le cas car la température utilisée correspond à celle d'une particule.
Le dernier point clé de modélisation concerne celui d'une équation d'évolution pour la NDF. Nous faisons le choix de l'équation de Williams-Boltzmann [Williams, 1958; Williams, 1985] couplée à un système d'équations de conservation pour le gaz. L'ensemble est présenté par la suite dans §3.3.

## 3.3 Equation cinétique couplée avec le gaz

### 3.3.1 Présentation de l'équation cinétique de Williams-Boltzmann

Une équation de transport de type Williams-Boltzmann (avec pour acronyme WB) analogue à l'équation de Boltzmann utilisée en théorie cinétique des gaz, est choisie afin de décrire l'évolution de la NDF. En effet, elle a démontré son intérêt pour l'étude des sprays polydisperses dilués et modérément denses [Williams, 1958; Williams, 1985; Doisneau, 2013]. Elle peut être couplée, par l'intermédiaire de termes sources, à une description eulérienne de la phase gazeuse exprimée soit au travers des équations d'Euler soit au travers des équations de Navier-Stokes que nous présentons dans la partie suivante. En prenant en compte les interactions entre particules telles que la coalescence ou encore la fragmentation secondaire et les échanges locaux de masse, de quantité de mouvement et d'énergie avec le gaz, l'équation d'évolution du spray s'écrit :

$$\partial_t f + \mathbf{u}.\partial_{\mathbf{x}} f + \partial_{\mathbf{u}}.\left(\frac{\mathbf{F}_p}{m_p} f\right) + \partial_T\left(\frac{\mathrm{H}_p}{m_p\, c_{p,p}} f\right) - \partial_S\left(\mathrm{K}_p f\right) = \mathcal{C} + \mathcal{B} \tag{3.13}$$

où $\mathbf{F}_p$ et $\mathrm{H}_p$ sont les termes d'échange de quantité de mouvement et de chaleur avec la phase gazeuse. Le terme $\mathrm{K}_p$ représente le taux de variation de la taille d'une particule en évaporation ou en condensation. Les termes d'interactions entre particules $\mathcal{B}$ et $\mathcal{C}$ correspondent respectivement à la fragmentation secondaire et aux collisions. Cette équation cinétique est aussi nommée en anglais Generalized Population Balance Equation (avec pour acronyme GPBE) dont une dérivation rigoureuse est proposée dans [Marchisio and Fox, 2013]. Cette équation est notamment utilisée pour la modélisation LES des écoulements à phase dispersée [Fox, 2012].
En première approche, les gouttes sont supposées sphériques au sein des MPS comme justifié dans §2.1.2, la taille de ces dernières peut donc s'exprimer indifféremment selon la variable surface $S$ ou le diamètre $d$ ou le rayon $r$. Ces trois variables sont reliées les unes aux autres par la relation d'équivalence $S = \pi d^2 = 4\pi r^2$. La masse d'une particule est donnée par : $m_p = (\rho_p\, S^{3/2})/(6\sqrt{\pi})$. Nous définissons $\rho_p$ la masse volumique de la phase liquide et $c_{p,p}$ la capacité calorifique du liquide.

**Description des termes de fermeture de l'équation cinétique**
Le terme d'échange de quantité de mouvement $\mathbf{F}_p$ se décompose en quatre forces principales comme présenté dans [Crowe et al., 1998] : 1- la gravité et la poussée d'Archimède 2- la traînée 3- la portance due à la rotation de la particule 4- La force d'histoire dû à la viscosité et l'effet de masse ajoutée correspondant à l'inertie générée par l'accélération du gaz autour de la particule.
Si le rapport de la masse volumique du gaz sur celle de la phase liquide est inférieur à $10^{-2}$, on montre que la traînée et la gravité sont les deux contributions majoritaires. Par la suite, nous négligeons la gravité ce qui est justifié dans la mesure où son importance est minoritaire par rapport à la traînée au sein d'un MPS.
Finalement, les termes de l'équation cinétique sont les suivants :
- $\mathbf{F}_p = m_p\, \mathrm{d}_t(\mathbf{u})$ est la force de traînée appliquée à la particule.
- $\mathrm{H}_p = m_p\, c_{p,p}\, \mathrm{d}_t(T)$ est le taux de variation d'énergie interne de la particule dû à l'échange de chaleur.
- $\mathrm{K}_p = -\mathrm{d}_t(S)$ est le taux de variation de la taille d'une particule. En excluant le phénomène de dilatation ou (contraction), seuls les phénomènes d'évaporation ou de condensation sont modélisés au travers du terme $\mathrm{K}_p$. Par convention, nous prendrons $\mathrm{K}_p > 0$ pour l'évaporation.
- $\mathcal{C}$ est le taux de variation de la NDF dû aux collisions et à la coalescence.
- $\mathcal{B}$ est le taux de variation de la NDF dû à la fragmentation secondaire.

Dans §2.3.3, nous avons présenté ces termes dans le contexte des gouttes bicomposants ; nous choisissons cependant de conserver un formalisme monocomposant dans une première approche, puis dans un second temps d'étendre le cadre d'étude dans §6.1 en proposant un conditionnement en fonction de la composition massique et non en fonction de la taille de la goutte.

### 3.3.2 Equations de conservation pour la phase gazeuse

Une description eulérienne de la phase gazeuse est considérée en utilisant les équations de Navier-Stokes écrites dans le contexte des écoulements multi-espèces. La dérivation de ces équations peut

suivre deux stratégies. La première consiste à établir des équations de bilan de masse, de quantité de mouvement et d'énergie sur un volume de contrôle en formalisme eulérien. Pour le cas des écoulements multi-espèces réactifs, les travaux présentés dans [Poinsot and Veynante, 2005] font référence. La seconde dérivation envisageable porte sur l'écriture d'un système d'équations de type fluide à partir de la théorie cinétique des gaz [Ern and Giovangigli, 1994; Massot, 1996; Giovangigli, 1999]. Ce système mixte hyperbolique/parabolique décrit autant l'hydrodynamique que les phénomènes tels que la dissipation visqueuse et la dissipation de masse et de chaleur. Sa structure mathématique a notamment été étudiée dans [Giovangigli and Massot, 1998].
L'écriture des équations du gaz présentées ci-dessous est faite dans le cadre des écoulements diphasiques mettant en jeu une phase dispersée suffisamment diluée i.e. pour $\alpha_p < 10^{-2}$. Ainsi, la fraction volumique occupée par la phase liquide n'impacte pas ou peu les systèmes d'équations de conservation du gaz et n'apparaît donc plus dans les différents termes des équations en dehors des termes sources ; cela constitue une différence majeure par rapport aux équations de l'approche bifluide que nous abordons dans §4.1.2.3. Le couplage entre phases se traduit uniquement sous la forme de termes sources. La physique de l'écoulement interne d'un MPS nous conduit naturellement à utiliser les équations de Navier-Stokes ; les équations d'Euler sont cependant employées à plusieurs reprises dans ce document car elles offrent un formalisme simplifié commode pour réaliser des études numériques de référence. De plus, en première approximation, il n'est pas aberrant de négliger des termes comme la viscosité pour apprécier certains phénomènes.

#### 3.3.2.1 Conservation de la masse et des espèces

L'équation de conservation pour la masse est :

$$\partial_t \rho_g + \partial_{\mathbf{x}}.\left(\rho_g \mathbf{u_g}\right) = S^{mass} \tag{3.14}$$

où $t$ désigne le temps, $\rho_g$ la masse volumique locale du gaz, $\mathbf{u_g}$ la vitesse et $S^{mass}$ le terme source de masse entre le gaz et les gouttes dû à l'évaporation.
Dans le cas où $\mathrm{N_{spec}}$ espèces sont représentées, les équations de conservation ont la forme suivante :

$$\begin{aligned} &\partial_t\left(\rho_g Y_i\right) + \partial_{\mathbf{x}}.\left(\rho_g Y_i \mathbf{u_g}\right) + \partial_{\mathbf{x}}.\left(\rho_g Y_i \mathbf{U_i^{diff}}\right) = 0, \qquad i = 1, \mathrm{N_{spec}} - 1 \\ &\partial_t\left(\rho_g Y_{vap}\right) + \partial_{\mathbf{x}}.\left(\rho_g Y_{vap} \mathbf{u_g}\right) + \partial_{\mathbf{x}}.\left(\rho_g Y_{vap} \mathbf{U_{vap}^{diff}}\right) = S^{mass} \end{aligned} \tag{3.15}$$

où $Y_i$ et $Y_{spec} = Y_{vap}$ sont respectivement les fractions massiques des espèces non soumises à des échanges de masse avec la phase dispersée et celle correspondant à l'espèce évaporante. Dans le cas plus spécifique de la combustion de gouttes, les réactions se font normalement en phase gazeuse. Néanmoins, les modèles présentés dans §2.4 ne mènent pas à une résolution d'une cinétique chimique en phase gazeuse. Il n'est donc pas fait usage de taux de production de masse dus à des réactions entre espèces dans ce travail. On s'intéresse plus à la consommation et à la production d'espèces oxydantes et produites comme c'est le cas pour le modèle de combustion avec les espèces globales $Y_{OX}$ et $Y_{PC}$. Les termes $\mathbf{U^{diff}}$ représentent les vitesses de diffusion des différentes espèces. En notant $\rho_i$ la masse volumique locale de chaque espèce et $\mathbf{u_i}$ sa vitesse hydrodynamique, on retient les définitions suivantes :

$$\rho_g = \sum_{i=1}^{\mathrm{N_{spec}}} \rho_i, \qquad \rho_g \mathbf{u_g} = \sum_{i=1}^{\mathrm{N_{spec}}} \rho_i \mathbf{u_i}, \qquad Y_i = \frac{\rho_i}{\rho_g}, \qquad \mathbf{U_i^{diff}} = \mathbf{u_i} - \mathbf{u_g} \tag{3.16}$$

On en déduit alors :

$$\sum_{i=1}^{\mathrm{N_{spec}}} Y_i = 1, \qquad \sum_{i=1}^{\mathrm{N_{spec}}} \rho_i Y_i = 0 \tag{3.17}$$

Les vitesses de diffusion des espèces peuvent être obtenues en supposant que l'effet Soret est négligeable c'est-à-dire que la diffusion de la masse est essentiellement due aux gradients thermiques. Il est proposé dans [Ern and Giovangigli, 1994] d'utiliser la loi de Fick pour calculer au premier ordre cette vitesse de diffusion :

$$\mathbf{U_i^{diff}} Y_i = -\mathrm{D}_i\, \partial_x.\left(Y_i\right) \tag{3.18}$$

où $\mathrm{D}_i$ est le coefficient de diffusion de l'espèce $i$ au sein du mélange. D'autres approches sont possibles comme présenté dans [Poinsot and Veynante, 2005].

#### 3.3.2.2 Conservation de la quantité de mouvement

L'équation de conservation de quantité de mouvement s'écrit :

$$\partial_t \left(\rho_g \mathbf{u_g}\right) + \partial_{\mathbf{x}}. \left(\rho_g \mathbf{u_g} \otimes \mathbf{u_g}\right) + \partial_{\mathbf{x}}. \left(\mathbf{T}\right) = S^{mom} \tag{3.19}$$

où $\mathbf{T}$ est le tenseur des pressions et $S^{mom}$ est le terme d'échange de quantité de mouvement entre le gaz et les gouttes qui regroupe la contribution de l'évaporation et de la force de traînée. Le tenseur $\mathbf{T}$ s'écrit :

$$\mathbf{T} = p\mathbf{I} - \boldsymbol{\tau} \tag{3.20}$$

où $\mathbf{I}$ est la matrice identité, $p$ est la pression thermodynamique et $\boldsymbol{\tau}$ est le tenseur des contraintes visqueuses. Dans le cas où l'on considère un fluide newtonien et une viscosité de volume négligeable, le tenseur $\tau$ est défini par :

$$\boldsymbol{\tau} = \mu_g \left(\partial_x \left(\mathbf{u_g}\right) + \partial_x \left(\mathbf{u_g}\right)^t\right) - \frac{2}{3}\mu_g \partial_x. \left(\mathbf{u_g}\right) \tag{3.21}$$

où $\mu_g$ est la viscosité dynamique du gaz.

#### 3.3.2.3 Conservation de l'énergie

L'équation de conservation de l'énergie totale massique du gaz s'écrit :

$$\partial_t \left(\rho_g E_g\right) + \partial_{\mathbf{x}}. \left(\rho_g E_g \, \mathbf{u_g}\right) + \partial_{\mathbf{x}}. \left(\mathbf{T}.\mathbf{u_g}\right) = -\partial_x.(\boldsymbol{q}) + S^{ener} \tag{3.22}$$

où $E_g$ est l'énergie totale massique définie par : $E_g = e_g + 0.5||\mathbf{u_g}||^2$, avec $e_g$ l'énergie interne massique du gaz. Dans cette équation, aucune source d'énergie n'est utilisée autre que celle provenant du terme d'échange avec les gouttes $S^{ener}$ car nous ne prenons pas en compte les réactions chimiques entre espèces ou toute autre source extérieure de chaleur. Le terme $\boldsymbol{q}$ est le flux d'énergie dû à la diffusion de chaleur et à la différence des enthalpies de diffusion des espèces :

$$\boldsymbol{q} = -\lambda_g \partial_x T_g + \rho_g \sum_{i=1}^{\mathrm{N_{spec}}} h_i \, Y_i \, \mathbf{U_i^{diff}} \tag{3.23}$$

où $\lambda_g$ est la conductivité thermique du gaz, $T_g$ est la température locale du gaz et $h_i$ est l'enthalpie massique de l'espèce $i$ définie par :

$$h_i = h_i^0 + \int_{T_{ref}}^{T_g} c_{p,i} \, T \, \mathrm{d}T \tag{3.24}$$

où $c_{p,i}$ est la capacité calorifique massique à pression constante de l'espèce $i$. Le terme $h_i^0$ est l'enthalpie de formation massique de l'espèce calculée à partir d'une température de référence $T_{ref}$. L'enthalpie massique du mélange gazeux s'écrit de la même manière :

$$h_g = \sum_{i=1}^{\mathrm{N_{spec}}} h_i^0 \, Y_i + \int_{T_{ref}}^{T_g} c_{p,g} \, T \, \mathrm{d}T = h_g^0 + \int_{T_{ref}}^{T_g} c_{p,g} \, T \, \mathrm{d}T \tag{3.25}$$

où $h_i^0$ est l'enthalpie massique de formation du gaz et $c_{p,g}$ est sa capacité calorifique massique définie par :

$$c_{p,g} = \sum_{i=1}^{\mathrm{N_{spec}}} c_{p,i} \, Y_i \tag{3.26}$$

Il est aussi possible d'écrire une équation de conservation sur l'enthalpie massique du gaz. En considérant la relation entre énergie totale massique et enthalpie massique du mélange : $h_g = e_g + p/\rho_g$, on obtient :

$$\partial_t \left(\rho_g h_g\right) + \partial_{\mathbf{x}}. \left(\rho_g h_g \, \mathbf{u_g}\right) + \boldsymbol{\tau} : \partial_x(\mathbf{u_g}) = \partial_t(p) - \partial_x.(\boldsymbol{q}) + S^{enth} \tag{3.27}$$

où $S^{enth}$ est le terme d'échange d'enthalpie massique entre le gaz et les gouttes.
Une équation de conservation sur l'énergie interne massique du gaz peut également être établie en retranchant à celle de l'énergie totale massique la contribution de l'énergie cinétique.

Les différentes grandeurs thermodynamiques telles que $\rho_g$ peuvent être reliées aux variables d'état $T$ et $p$. Pour un gaz parfait, la relation d'état s'écrit :

$$\frac{p}{\rho_g} = \frac{R\,T_g}{\mathcal{M}_g} = r_g\,T_g \tag{3.28}$$

où $R$ est la constante universelle des gaz parfaits, $r_g$ une constante qui dépend de la masse molaire du mélange gazeux $\mathcal{M}_g$ définie par :

$$\mathcal{M}_g = \left(\sum_{i=1}^{\mathrm{N_{spec}}} \frac{Y_i}{\mathcal{M}_i}\right)^{-1} \tag{3.29}$$

où $\mathcal{M}_i$ est la masse molaire de l'espèce $i$.
Finalement, le système d'équations de conservation pour le gaz s'écrit :

$$\begin{cases} \partial_t \rho_g + \partial_{\mathbf{x}}.\left(\rho_g \mathbf{u_g}\right) = S^{mass} \\ \partial_t\left(\rho_g Y_{vap}\right) + \partial_{\mathbf{x}}.\left(\rho_g Y_{vap}\mathbf{u_g}\right) + \partial_{\mathbf{x}}.\left(\rho_g Y_{vap}\mathbf{U^{diff}_{vap}}\right) = S^{mass} \\ \partial_t\left(\rho_g Y_i\right) + \partial_{\mathbf{x}}.\left(\rho_g Y_i \mathbf{u_g}\right) + \partial_{\mathbf{x}}.\left(\rho_g Y_i \mathbf{U^{diff}_i}\right) = 0, \qquad i = 1, \mathrm{N_{spec}} - 1 \\ \partial_t\left(\rho_g \mathbf{u_g}\right) + \partial_{\mathbf{x}}.\left(\rho_g \mathbf{u_g} \otimes \mathbf{u_g} + p\right) = S^{mom} \\ \partial_t\left(\rho_g h_g\right) + \partial_{\mathbf{x}}.\left(\rho_g h_g\,\mathbf{u_g}\right) + \boldsymbol{\tau} : \partial_x(\mathbf{u_g}) = \partial_t(p) - \partial_x.(\boldsymbol{q}) + S^{enth} \end{cases} \tag{3.30}$$

Tel qu'il est écrit dans [Laurent and Massot, 2001; Laurent et al., 2004b], les termes sources de couplage entre le gaz et la phase dispersée se présentent de manière générale de la façon suivante :

$$\begin{aligned} S^{mass} &= \int\int\int \rho_l\,\mathrm{K}_p\,\mathrm{d}_S(V)\,f\;\mathrm{d}\mathbf{u}\mathrm{d}T\mathrm{d}S \\ S^{mom} &= \int\int\int \rho_l\,\mathbf{u}\,\mathrm{d}_S(V)\,f\;\mathrm{d}\mathbf{u}\mathrm{d}T\mathrm{d}S + \int\int\int \rho_l\,V\,\mathbf{F}_p\,f\;\mathrm{d}\mathbf{u}\mathrm{d}T\mathrm{d}S \\ S^{enth} &= \int\int\int \rho_l\,c_{p,l}\,T\,\mathrm{K}_p\,\mathrm{d}_S(V)\,f\;\mathrm{d}\mathbf{u}\mathrm{d}T\mathrm{d}S + \int\int\int \rho_l\,c_{p,l}\,V\,H_p\,f\;\mathrm{d}\mathbf{u}\mathrm{d}T\mathrm{d}S \end{aligned} \tag{3.31}$$

où $V$ correspond au volume de la particule. Ces termes sources de couplage avec le gaz dépendent des termes $\mathrm{K}_p$, $\mathbf{F}_p$ et $H_p$ qui sont détaillés dans §3.4.

#### 3.3.2.4 Quantités de référence et relations de base

On se propose ici de donner l'expression de plusieurs quantités de référence utilisées fréquemment au cours de cette thèse pour caractériser la phase gazeuse. Certains de ses nombres caractéristiques sont repris pour décrire la phase dispersée. La notion de temps caractéristique est souvent abordée ; si $L_0$ et $U_0$ sont respectivement une longueur et une vitesse de référence du problème, il est alors possible de déterminer un temps caractéristique convectif de l'écoulement par :

$$\tau_g^c = \frac{L_0}{U_0} \tag{3.32}$$

De même, le temps caractéristique acoustique s'écrit :

$$\tau^{acou} = \frac{L_0}{c_0} \tag{3.33}$$

où $c_0$ est la vitesse du son dans le gaz sans prise en compte de la présence des particules. Cette vitesse est définie pour un gaz parfait par :

$$c_0 = \sqrt{\gamma\,r_g\,T_0} = \sqrt{\frac{\gamma\,p}{\rho}} \tag{3.34}$$

où $\gamma$ est le coefficient isentropique du gaz qui correspond au rapport des capacités calorifiques massiques à pression constante $c_{p,g}$ et à volume constant $c_{v,g}$.
Certains nombres sans dimension sont particulièrement employés pour différencier les régimes d'écoulement gazeux, on trouve notamment le nombre de Reynolds $Re$ et le nombre de Mach $M$ :

$$Re = \frac{\rho\, L_0\, U_0}{\mu_g}, \qquad M_a = \frac{U_0}{c_0} \tag{3.35}$$

Le nombre de Reynolds met en concurrence le mode de transfert par convection au mode de transfert par diffusion de la quantité de mouvement. Il intervient dans la classification des écoulements laminaires ($Re < 200$), transitoires et turbulents ($Re > 4000$). Ces valeurs sont données à titre indicatif car il ne s'agit que d'ordres de grandeur. Il faut retenir que pour $Re << 1$, l'écoulement est piloté par la viscosité alors que pour $Re >> 1$ ce sont les forces d'inertie qui dominent. Dans un MPS, c'est la deuxième situation qui est la plus fréquemment rencontrée. Cependant, le régime pleinement turbulent est loin d'être atteint au sein de la chambre comme expliqué dans §1.2.4.1.
Le nombre de Mach met en rapport les forces de mouvement à la compressibilité du milieu ; on discrimine alors les écoulements subsoniques ($M_a < 0.95$), transsoniques et supersoniques ($M_a > 1$). Pour des écoulements dont le Mach est inférieur à 0.3, la compressibilité du milieu peut être négligé. Dans le contexte de nos études, nous travaillons avec des valeurs supérieures ; cela est principalement dû à la présence de la tuyère. Les écoulements étudiés sont donc compressibles.
D'autres nombres adimensionnés peuvent être utilisés tels que :

$$\mathrm{Sc}_i = \frac{\mu_g}{\rho\, \mathrm{D}_i}, \qquad \mathrm{Le}_i = \frac{\lambda_g}{\rho\, c_{p,g}\, \mathrm{D}_i}, \qquad \mathrm{Pr} = \frac{c_{p,g}\, \mu_g}{\lambda_g} \tag{3.36}$$

où $Sc_i$ et $\mathrm{Le}_i$ sont respectivement les nombres de Schmidt et de Lewis de l'espèce gazeuse $i$. Le premier nombre compare la diffusivité de quantité de mouvement à la diffusivité de l'espèce $\mathrm{D}_i$ alors que le second représente le rapport entre la diffusivité de l'espèce à sa diffusivité thermique. Le nombre de Prandtl Pr correspond au rapport entre diffusivité de quantité de mouvement à la diffusivité thermique. Ces trois nombres sont donc reliés par la relation : $\mathrm{Le}_i = \mathrm{Sc}_i/\mathrm{Pr}$.

### 3.3.3 Le modèle Gaz Equivalent comme une approche monofluide globale

Le modèle Gaz Equivalent, noté GE, considère un seul fluide représentatif de l'écoulement gaz+spray en retenant des propriétés thermophysiques moyennes. Ce modèle est dérivé en supposant que les termes sources d'échanges entre le gaz et les gouttes sont relaxés à vitesse rapide ; le système est donc abordé sous l'angle d'un problème de perturbation singulière. Dans cette approche, la phase gazeuse et la phase dispersée sont alors en équilibres dynamique et thermique ce qui signifie que leurs échanges sont infiniment rapides ; il n'y a donc pas d'écarts de vitesse et de température entre les phases et les termes sources sont nuls. Si l'écoulement diphasique étudié correspond à ce régime, il s'agit de définir une phase gazeuse dont les grandeurs caractéristiques correspondent au mélange des particules et du gaz. La simplification du modèle via l'emploi d'une approche gaz monoespèce représentative du mélange des espèces est le plus souvent réalisée. Les différents constituants de l'écoulement diphasique sont indicés $i$. La masse molaire du mélange est définie par :

$$\mathcal{M}_m = \frac{1}{\sum_{\mathrm{N_{spec}}} n_i} \sum_{i=1}^{\mathrm{N_{spec}}+1} n_i\, \mathcal{M}_i \tag{3.37}$$

où $\mathrm{N_{spec}}$ est le nombre d'espèces de la phase gazeuse et l'espèce $\mathrm{N_{spec}} + 1$ représente la phase dispersée. Les termes $n_i$ et $\mathcal{M}_i$ sont respectivement les quantités de matière des différentes espèces (gaz et particules) exprimées en moles et leurs masses molaires. La capacité calorifique massique du mélange équivalent s'écrit :

$$c_{p,m} = \sum_{i=1}^{\mathrm{N_{spec}}+1} Y_i\, c_{p,i} \tag{3.38}$$

où $Y_i$ est la fraction massique du constituant $i$ et $c_{p,i}$ sa capacité calorifique massique. Le mélange gazeux équivalent se comporte comme un gaz parfait qui suit une équation d'état basée sur les grandeurs moyennes :

$$p_m = \rho_m \frac{R}{\mathcal{M}_m} T_m \tag{3.39}$$

où $\rho_m$ et $T_m$ sont la masse volumique et la température moyennes du mélange. La vitesse du son dans le milieu diphasique est égale à :

$$c_m = \sqrt{\gamma_m \frac{R}{\mathcal{M}_m} T_m} \tag{3.40}$$

Les quantités moyennes du mélange gaz+particules, respectivement indicés $g$ et $p$, s'écrivent donc :

$$\begin{array}{l} \rho_m = \rho_g \alpha_g + \rho_p \alpha_p \\ \rho_m \mathbf{u_m} = \rho_g \alpha_g \mathbf{u_g} + \rho_p \alpha_p \mathbf{u_p}, \quad \text{avec } \mathbf{u_g} = \mathbf{u_p} \\ \rho_m E_m = \rho_g \alpha_g E_g + \rho_p \alpha_p E_p \end{array} \tag{3.41}$$

où $E_k$ est l'énergie totale de la phase $k \in \{g, p\}$. Ecrit avec le formalisme d'un système d'équations de conservation d'Euler, le système fluide du Gaz Equivalent est :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t \rho_m + \partial_{\mathbf{x}} . (\rho_m \mathbf{u_m}) = 0 \\ \\ \partial_t (\rho_m \mathbf{u_m}) + \partial_{\mathbf{x}} . (\rho_m \mathbf{u_m} \otimes \mathbf{u_m} + p_m) = 0 \\ \\ \partial_t (\rho_m E_m) + \partial_{\mathbf{x}} . (\rho_m E_m \, \mathbf{u_m}) + \partial_x (p_m \mathbf{u_g}) = 0 \end{array} \right. \tag{3.42}$$

Le modèle GE est particulièrement apprécié car il s'agit d'une approche réduite au travers d'un unique système d'équations de conservation tel que Navier-Stokes ou Euler. Un gain significatif en termes de temps de calcul est assuré car les phénomènes hors équilibre c'est-à-dire le glissement ou encore les écarts de température ne sont pas modélisés. La phase dispersée n'est donc pas décrite et ses échanges avec le gaz n'ont pas à être résolus. L'absence de description des interactions entre phases fait du modèle GE une approche rapide, introduisant un minimum de contraintes numériques, pour évaluer le comportement hydrodynamique global d'un écoulement interne d'un MPS.

Cette modélisation est cependant très limitée dans un grand nombre de cas d'études où les particules ne peuvent pas être vues comme des traceurs dans l'écoulement. Les écarts de vitesse et de température entre phases qui apparaissent lorsque le nombre de Stokes de la particule grandit ne peuvent plus être négligés. En effet, l'influence de la phase dispersée sur le gaz est particulièrement marquée quand $St \approx 1$. Dans ce cas précis, on s'attend notamment à une atténuation maximale des ondes acoustiques (cf. §2.2.1). De plus, le modèle GE ne prend absolument pas en compte des phénomènes physiques tels que la combustion des gouttes. Finalement, l'approche GE est choisie comme modèle monophasique équivalent pour mettre en évidence la contribution des effets diphasiques sur les instabilités moteurs comme proposé dans les simulations numériques des chapitres 12 et 13.

## 3.4 Modèles à l'échelle de la goutte pour la fermeture de l'équation WB

Dans un premier temps, nous présentons l'expression de la force de traînée et du terme d'échange de chaleur dans le cas d'une goutte inerte. Dans un second temps, nous donnons les relations reliant les termes de transfert de masse et de chaleur pour deux situations à savoir des cas d'évaporation de gouttes dans leur propre vapeur et dans un milieu gaz multi-espèce. Entre ces deux situations, l'expression des transferts de chaleur et de masse est donc différent, reposant sur la conductivité thermique pour la première approche et sur la diffusion des espèces pour la seconde. En plus d'une certaine représentativité dans le cadre d'applications industrielles, ces deux modèles offrent dans notre cas d'étude la possibilité de tester différentes stratégies numériques de couplage entre les phases gazeuse et dispersée. Pour ces deux modèles, nous ne prenons pas en compte une conduction thermique au sein de la goutte comme proposé dans [Abramzon and Sirignano, 1989; Sirignano, 2010]. En effet, décrire un profil thermique n'est pas compatible avec une description cinétique du spray et est particulièrement difficile à traiter avec une approche statistique comme expliqué dans [Laurent and Massot, 2001] où une argumentation détaillée est proposée. Pour le chauffage des gouttes, une hypothèse de conductivité infinie est faite pour l'ensemble de nos travaux, i.e. la température de la goutte est la même en tout point de la goutte, y compris en surface. Cette hypothèse est pertinente ici car les gouttes sont relativement petites et la conductivité thermique de l'aluminium et de l'alumine est particulièrement élevée.

### 3.4.1 Cas d'une goutte inerte

#### 3.4.1.1 Force de traînée

Pour une goutte isolée, la force de traînée s'exprime ainsi :

$$\mathbf{F}_p = \frac{1}{8}\,\pi\,\rho_g\,d^2\,C_D\,\|\mathbf{u_g}-\mathbf{u}\|\,(\mathbf{u_g}-\mathbf{u}),\quad C_D = f(Re_p) \tag{3.43}$$

où $C_D$ est le coefficient de traînée qui est fonction uniquement du nombre de Reynolds particulaire $Re_p$ dans les régimes d'écoulements étudiés. Il est défini par :

$$Re_p = \rho_g\,d\|\mathbf{u_g}-\mathbf{u}\|/\mu_g \tag{3.44}$$

où $\mu_g$ est la viscosité dynamique du gaz. Le coefficient de traînée s'écrit :

$$\begin{cases} C_D = \dfrac{24}{Re_p} & si \quad Re_p < 1 \\ C_D = \dfrac{24}{Re_p}(1+0{,}15Re_p^{0{,}687}) & si \quad 1 \leq Re_p \leq 1000 \\ C_D = 0{,}445 & si \quad 1000 < Re_p \end{cases} \tag{3.45}$$

Quand $Re_p < 1$, il s'agit du régime de Stokes. Pour des valeurs supérieures rencontrées, par exemple dans les tuyères des MPS, la corrélation de Shiller-Naumann peut être employée [Schiller and Naumann, 1935]. Quel que soit le régime considéré, un temps caractéristique dynamique $\tau_u$ peut être déterminé afin d'estimer le temps de réponse de la goutte à un changement du champ de vitesse du gaz. En régime de Stokes, la force de traînée et le temps de relaxation dynamique s'écrivent :

$$\mathbf{F}_p = m_p\frac{\mathbf{u_g}-\mathbf{u}}{\tau_u(d)},\quad \tau_u(d) = \frac{\rho_p\,d^2}{18\,\mu_g} \tag{3.46}$$

Le temps de relaxation $\tau_u$ dépend alors du carré du diamètre des gouttes. Ainsi, une granulométrie étendue représente des spectres de temps caractéristiques et de nombres de Stokes particulièrement larges. Cette situation est souvent rencontrée en propulsion solide où les phénomènes d'agglomération, de combustion, de coalescence et de fragmentation sont à l'origine d'une polydispersion significative. Aussi, dans des cas de forts Reynolds particulaires, le terme de correction convectif tend à augmenter le transfert de quantité de mouvement ce qui revient à diminuer le temps de relaxation de la goutte.

#### 3.4.1.2 Transfert de chaleur

Pour une goutte isolée, le terme d'échange de chaleur entre cette dernière et l'environnement est égal à :

$$\mathrm{H}_p = \pi\, d\, \lambda_g\, Nu_c\, (T_g - T)\,, \quad Nu_c = 2 + 0.6\, Re_p^{1/2}\, \mathrm{Pr}^{1/3} \tag{3.47}$$

où $Nu_c$ est le nombre de Nusselt, terme correctif lié à la convection fonction du nombre de Reynolds particulaire. Cette relation s'écrit avec la variable surface $S$ :

$$\mathrm{H}_p = \pi^{1/2}\, S^{1/2}\, \lambda_g\, Nu_c(S)\, (T_g - T) \tag{3.48}$$

### 3.4.2 Cas d'une goutte en évaporation

#### 3.4.2.1 Evaporation contrôlée par la conductivité thermique

Pour l'étude des gouttes dans leur propre vapeur, l'évaporation ne peut être contrôlée par la diffusion des espèces. Seul le transfert de chaleur dirige la dynamique du transfert de masse entre la goutte et le gaz. Comme illustré dans [Williams, 1985], l'échange de masse résulte d'un déséquilibre thermique entre les deux phases. En effet, il n'y a aucune évaporation quand les deux milieux sont à la même température ou tant que la température de surface de la goutte est inférieure à sa température de saturation $T_{sat}$. Dans ce cas particulier, la température de saturation correspond exactement au point d'ébullition du liquide. On rappelle que pour nos études, nous faisons une hypothèse de conductivité infinie où il n'y a pas de gradient thermique au sein de la goutte (cf. § 2.3.3), la température de la goutte est la même dans le coeur liquide et à sa surface.
Pour ce modèle, le transfert de masse dépend donc de la différence entre les températures des deux phases qui s'exprime au travers du nombre de Spalding thermique $B_T$. Pour une goutte isolée, le transfert de masse $\dot{m}_p$ s'écrit sous la forme suivante :

$$\dot{m}_p = \pi d \frac{\lambda_g}{c_{p,g}} Nu_c \ln(1 + B_T), \qquad B_T = \frac{c_{p,g}(T_g - T)}{L_v} \tag{3.49}$$

Le taux de variation de la taille d'une goutte $\mathrm{K}_p$ utilisé dans Eq.(3.13) peut être calculé à partir du taux de transfert de masse en considérant que l'échange se fait sur toute la surface de la goutte sphérique :

$$\dot{m}_p = -\mathrm{d}_t \left( \frac{\rho_l\, S^{3/2}}{6\sqrt{\pi}} \right) = -\frac{\rho_l\, S^{1/2}}{4\sqrt{\pi}} \mathrm{d}_t S = \frac{\rho_l\, S^{1/2}}{4\sqrt{\pi}} \mathrm{K}_p \tag{3.50}$$

Le terme d'échange de chaleur se divise en deux contributions : l'énergie nécessaire au changement de phase $\dot{m}_p L_v$ et la chaleur absorbée par la phase liquide $Q_p$. Le terme de transfert s'écrit :

$$\mathrm{H}_p = Q_p - \dot{m}_p L_v, \quad Q_p = \pi\, d\, \lambda_g\, Nu_c\, (T_g - T) \tag{3.51}$$

Il est à noter que lorsque que l'évaporation a lieu, les deux contributions s'équilibrent. Toute la chaleur reçue $Q_p$ est consommée pour le changement de phase $\dot{m}_p L_v$. La température de la goutte demeure constante et égale à $T_{sat}$. Comme cela a déjà été présenté auparavant pour le temps de réponse dynamique de la goutte, un temps thermique $\tau_T$ peut être exprimé. En régime de Stokes, l'énergie reçue pour le chauffage de la goutte s'écrit :

$$Q_p = m_p c_{p,p} \frac{T_g - T}{\tau_T(d)}, \quad \tau_T(d) = \frac{3\, c_{p,p}}{2\, c_{p,g}}\, \mathrm{Pr}\, \tau_u(d) \tag{3.52}$$

Nous remarquons que les temps de relaxation dynamique et thermique sont du même ordre de grandeur.

#### 3.4.2.2 Evaporation contrôlée par la diffusion des espèces

Dans le cas le plus classique, l'évaporation de la goutte se fait dans un milieu gazeux multi-espèce. La dynamique pour le transfert de masse est contrôlé par la diffusion des espèces exprimée au travers du nombre de Spalding massique $B_M$. Présenté dans [Sirignano, 2010], le débit massique pour une goutte isolée s'écrit :

$$\dot{m}_p = \pi d \frac{\mu_g}{\mathrm{Pr}} Nu_c \ln(1 + B_M), \qquad B_M = \frac{Y_{A,s} - Y_{A,\infty}}{1 - Y_{A,s}} \tag{3.53}$$

où les termes $Y_{A,s}$ et $Y_{A,\infty}$ sont respectivement les fractions massiques de l'espèce évaporante à la surface de la goutte et loin de celle-ci. A la différence du modèle basé sur la conductivité thermique, l'évaporation a lieu même si la goutte n'a pas atteint sa température de saturation. Dans ce régime de chauffage, les termes $Q_p$ et $\dot{m}_p L_v$ ne sont pas égaux et l'échange d'énergie $\mathrm{H}_p$ défini dans Eq.(3.51) est positif ; cela permet d'accroître la température de la goutte. Dans cette description, les termes $Q_p$ et $B_T$ sont des fonctions du taux d'évaporation ce qui conduit à une dépendance forte entre le chauffage de la goutte et le transfert de masse :

$$Q_p = \frac{\dot{m}_p c_{p,g}}{B_T}\left(T_g - T\right), \qquad B_T = \frac{c_{p,g}(T_g - T)}{L_v + \frac{\mathrm{H}_p}{\dot{m}_p}} \tag{3.54}$$

La goutte cesse de chauffer quand sa température atteint sa valeur de saturation. Il est à noter que $T_{sat}$ est fonction de la pression et de la composition du gaz dans l'environnement proche de la goutte.
D'autres expressions du débit massique évaporé peuvent être employées :

$$\dot{m}_p = \pi\, d\, \mathrm{D_A}\, Sh_c^*\, \ln(1 + B_M) \tag{3.55}$$

$$Sh_c^* = 2 + \frac{Sh_c - 2}{\mathrm{F_M}(B_M)} \qquad Sh_c = 2 + 0{,}6\, Re_p^{1/2}\, S_{cA}^{1/3} \tag{3.56}$$

où $Sh_c$ est le nombre de Sherwood correctif lié à la convection et $Sh_c^*$ est le nombre de Sherwood qui prend en compte l'effet de film. Le terme $\mathrm{D_A}$ est le coefficient de diffusion de l'espèce évaporante dans la phase gazeuse. $S_{cA}$ est le nombre de Schmidt pour l'espèce évaporante. Notons aussi la présence du terme $\mathrm{F_M}(B_M)$ qui représente le facteur correctif du nombre de Spalding massique dans l'expression du nombre de Sherwood modifié par l'effet de film.

## Conclusion du chapitre 3

Les écoulements à phase dispersée rencontrés au sein des moteurs à propergol solide sont décrits comme modérément denses avec une polydispersion particulièrement marquée due à des phénomènes d'agglomération en surface et de combustion, de coalescence et de fragmentation dans la chambre et la tuyère. Dans nos applications, le couplage avec la phase gazeuse est significatif et la dynamique du spray est conditionnée par la taille des gouttes. Nous avons ainsi justifié le choix d'une équation cinétique de Williams-Boltzmann pour décrire l'évolution du spray polydisperse. Dans cette approche, le couplage fort avec le gaz se fait via des termes sources pour les équations de conservation écrites avec le formalisme de Navier-Stokes.
Les chapitres constituant la seconde partie de cette thèse portent sur la résolution de l'équation cinétique et la dérivation de méthodes eulériennes, de type lois de conservation pour les deux phases, adaptées à notre cadre d'étude. Les principaux objectifs sont le suivi de la polydispersion du spray et de la bicomposition des gouttes, et ce, à un coût raisonnable pour des simulations industrielles.

Deuxième partie

# Modélisation eulérienne des sprays réactifs polydisperses et bicomposants

# Chapitre 4

# Méthodes eulériennes pour les sprays polydisperses

*Dans un premier temps, nous justifions le choix d'une résolution eulérienne de l'équation cinétique dans le cadre des sprays réactifs fortement couplés à une phase gazeuse instationnaire. Nous rappelons aussi les principaux points d'améliorations nécessaires à une approche eulérienne à savoir la description de la polydispersion et la prise en compte des croisements de trajectoires des particules. Dans le contexte de cette thèse, nous présentons un état de l'art des différentes stratégies eulériennes assurant un suivi précis de la distribution en taille au travers d'une représentation fidèle de la NDF. Dans la seconde partie, nous introduisons les méthodes Multi-Fluide (MF), aussi nommées méthodes sectionnelles, basées sur une approche continue des tailles. Nous détaillons alors les deux étapes de dérivation de l'approche sectionnelle : 1- les choix de fermeture pour la dispersion en vitesse et en température des gouttes d'une même taille. 2- Le niveau de description de la polydispersion via l'emploi d'un certain nombre de moments en taille. Nous présentons ainsi une hiérarchie des approches MF développées à ce jour. Finalement, nous choisissons la méthode offrant le meilleur compromis coût/précision ainsi qu'une grande flexibilité pour décrire les écoulements diphasiques en propulsion solide qui présentent de la combustion, de la coalescence et de la fragmentation.*

## 4.1 Description cinétique et approches eulériennes

### 4.1.1 Résolution de l'équation cinétique

#### 4.1.1.1 Rappel de l'équation de WB pour les sprays réactifs

L'équation de transport de type Williams-Boltzmann est choisie afin de décrire l'évolution de la NDF. En effet, elle a démontré son intérêt pour l'étude des sprays polydisperses dilués ou modérément denses [Williams, 1958; Williams, 1985; Doisneau, 2013]. En ne prenant pas en compte les interactions entre particules telles que la coalescence, la fragmentation secondaire et en se focalisant uniquement sur les échanges locaux de masse, de quantité de mouvement et d'énergie avec le gaz, l'équation d'évolution du spray s'écrit :

$$\partial_t f + \mathbf{u}.\partial_{\mathbf{x}} f + \partial_{\mathbf{u}}.\left(\frac{\mathbf{F}_p}{m_p} f\right) + \partial_T\left(\frac{\mathrm{H}_p}{m_p\, c_{p,p}} f\right) - \partial_S\left(\mathrm{K}_p f\right) = 0 \tag{4.1}$$

Les dépendances pour les termes $\mathbf{F}_p$, $\mathrm{H}_p$ et $\mathrm{K}_p$ s'écrivent :

$$\begin{cases} \mathbf{F}_p = \mathbf{F}_p\left(\mathbf{u}, \mathbf{u_g}, S\right) \\ \mathrm{H}_p = \mathrm{H}_p\left(\mathbf{u}, \mathbf{u_g}, S, T, T_g\right) \\ \mathrm{K}_p = \mathrm{K}_p\left(\mathbf{u}, \mathbf{u_g}, S, T, T_g\right) \end{cases} \tag{4.2}$$

En conservant la notation des chapitres précédents, les termes $\mathbf{u_g}$ et $T_g$ correspondent au vecteur vitesse et à la température du gaz.

#### 4.1.1.2 Les méthodes lagrangiennes

Deux stratégies sont envisageables pour résoudre de manière plus abordable l'équation cinétique : l'approche lagrangienne permettant une résolution de la NDF au travers d'une discrétisation de l'espace des phases et l'approche eulérienne basée sur des méthodes de moments et la résolution de quantités globales telles que la concentration massique, la quantité de mouvement et l'énergie. Les points clés de dérivation des méthodes eulériennes sont données par la suite dans §4.1.2. Ici, nous présentons synthétiquement les deux principales approches lagrangiennes statistiques rencontrées dans la littérature :

– Comme évoqué dans §3.2.2, la première méthode reprend le formalisme de la méthode DPS à la différence qu'une seule particule numérique représente un ensemble de particules physiques ; elle est alors nommée Stochastic Parcel method dans [O'Rourke, 1981]. Cette méthode est également appelée "discrete element method" dans [Crowe et al., 1998] ou encore "multicontinua method" dans [Sirignano, 2010] où les particules numériques sont définies comme des classes de particules. Le coût de la méthode est ainsi maîtrisé car le nombre de particules numériques est choisi de manière à être abordable pour une configuration donnée. La méthode est implémentée dans de nombreux codes tels que le code KIVA [Amsden et al., 1989] et est utilisée dans de nombreuses applications industrielles.

– L'approche statistique est également vue comme une méthode de résolution de l'équation cinétique et est nommée Direct Simulation Monte-Carlo method (avec DSMC pour acronyme). Développée dans un premier temps pour l'étude des gaz raréfiés [Bird, 1994], elle repose sur la description et le suivi des quantités globales, appelés moments de la NDF, et sur un nombre suffisamment élevé de particules numériques pour obtenir une solution convergée. Le formalisme choisi, notamment dans [Hylkema, 1999] pour l'étude des collisions de particules, utilise une somme de fonctions Dirac pour décrire la NDF :

$$f(t,\mathbf{x},\mathbf{u},T,S)=\sum_{k=1}^{N_p} w_k\,\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_k(t))\,\delta(S-S_k(t))\,\delta(\mathbf{u}-\mathbf{u}_k(t))\,\delta(T-T_k(t)) \tag{4.3}$$

où $w_k$ représente le poids de la $k$-ième particule numérique (constant car il n'y a ni fragmentation ni coalescence) et les termes $\mathbf{x}_k$, $\mathbf{u}_k$, $S_k$ et $T_k$ sont respectivement sa position, sa vitesse, sa surface et sa température. Ces derniers suivent les équations différentielles ordinaires suivantes :

$$\partial_t\mathbf{x}_p=\mathbf{u}_p,\quad \partial_t\mathbf{u}_p=\mathbf{F}_p,\quad \partial_t S_p=K_p,\quad \partial_t T_p=H_p \tag{4.4}$$

où $\mathbf{F}_p$, $H_p$ et $K_p$ sont respectivement les termes de fermeture rappelés dans §4.1.1.1. Le poids $w_k$ de la particule numérique est un nombre réel représentant une fraction de la particule physique étudiée qui est établie en fonction du raffinement désiré. Le nombre de particules numériques peut donc être particulièrement élevé et apparaître comme une contrainte pour des configurations complexes et pour l'étude d'un grand nombre de phénomènes. Cependant, la méthode Monte-Carlo offre l'avantage de travailler sur des quantités moyennées assurant une projection fidèle des propriétés de la NDF sur un champ eulérien. Le niveau de représentativité spatiale des grandeurs projetées est similaire à celui des méthodes eulériennes où ces dernières sont rattachées à un repère fixe et non aux particules en mouvement. Une étude plus détaillée est proposée dans [de Chaisemartin, 2009] où la question du coût calcul est posée.

Sans prise en compte du phénomène de collisions, les deux méthodes lagrangiennes diffèrent par le niveau de raffinement atteint. En effet, la convergence de la solution pour la méthode Monte-Carlo requiert un très grand nombre de particules numériques alors que la méthode Stochastic Parcel revient à une approche grossière de la technique DPS et à n'étudier qu'une seule réalisation. Au final, le niveau de précision dépend du nombre de particules numériques qu'il est possible de suivre avec les moyens informatiques à disposition.

#### 4.1.1.3 Choix de la résolution eulérienne

Dans ce paragraphe, nous établissons les avantages et les inconvénients des approches eulérienne et lagrangienne.
L'approche lagrangienne offre une rapidité et une précision de calcul notables pour les cas stationnaires. Des phénomènes physiques tels que les rebonds aux parois sont restitués fidèlement. De plus, l'implémentation de nouveaux modèles à l'échelle de la goutte se fait très facilement et

naturellement avec le formalisme lagrangien alors qu'elle nécessite des développements numériques dédiés et parfois lourds avec les méthodes eulériennes. Malgré ces avantages, le nombre de particules nécessaire pour assurer une bonne convergence de la simulation devient important en 3D. Cela est particulièrement coûteux pour des simulations instationnaires quand la distribution en taille doit être bien approchée et que l'on vise une bonne approximation de la répartition spatiale du spray.
Pour réaliser le couplage avec la phase porteuse, la projection des termes sources de masse, de quantité de mouvement et d'énergie correspondants aux positions des particules sur une grille eulérienne a longtemps été un challenge numérique car elle introduit de la diffusion numérique.
De récents travaux [Capecelatro and Desjardins, 2013; Zamansky et al., 2014] basés sur une nouvelle stratégie de filtrage volumique assurent un couplage entre les phases quel que soit le raffinement du maillage. Cette technique est actuellement limitée aux maillages structurés. De plus, la précision atteinte dans le cas d'un couplage fort n'est pas garantie, plus particulièrement quand la phase gazeuse est résolue à l'aide de méthodes numériques d'ordre élevé. Ces nouvelles approches lagrangiennes deviennent de plus en plus intéressantes à utiliser sur des architectures parallèles. Néanmoins, le rapport coût/précision reste encore à étudier. En effet, un tel modèle peut être coûteux dans des configurations où l'on cherche à décrire fidèlement les interactions entre un spray polydisperse et une phase gazeuse instationnaire.
La résolution eulérienne de la description cinétique du spray apparaît comme une alternative intéressante car le couplage avec une description eulérienne de la phase gazeuse est naturel et son utilisation dans le cadre de calculs parallèles est particulièrement facilitée. Cependant, les méthodes eulériennes présentent deux difficultés par rapport aux approches lagrangiennes :

1. La description de la polydispersion du spray est loin d'être évidente alors qu'elle semble plus aisée avec les méthodes lagrangiennes même si le coût calcul peut sembler excessif pour des configurations industrielles.

2. Pour des écoulements présentant des nombres de Knudsen élevés, il est nécessaire de décrire les croisements des trajectoires de particules (PTC). Ces situations, naturellement prises en compte par les approches lagrangiennes, s'avèrent être un problème majeur pour les méthodes eulériennes qui considèrent une seule vitesse moyenne en un point de l'espace, autrement dit des distributions en vitesse monodisperses [de Chaisemartin, 2009].

Dans cette thèse, nous répondons aux attentes du premier point en proposant une famille de méthodes eulériennes aptes à décrire la polydispersion avec un niveau de résolution satisfaisant sans introduire un coût calcul rédhibitoire pour des calculs industriels. Concernant le second point, des solutions numériques pour le traitement des PTC ont récemment été apportées dans [Vié et al., 2015] où est considérée une fermeture Gaussienne anisotrope pour la distribution en vitesse locale des gouttes. Nous n'étudions pas ici ces nouvelles méthodes mais nous évoquons cependant dans §4.2.1 pour quelles situations ces dernières peuvent être appliquées et quels sont les développements numériques associés. La problématique de la polydispersion en vitesse fait l'objet de travaux récents et à venir [Doisneau et al., 2012; Vié et al., 2015; Dupif, 2017].

### 4.1.2 Stratégies eulériennes basées sur des méthodes de moments

La méthode la plus directe est la résolution exacte de l'équation cinétique reposant sur une discrétisation de l'ensemble des variables dont dépend la NDF à savoir l'espace des phases $(\mathbf{u}, S, T)$. Cette méthode, appelée "Full Spray Method" dans [O'Rourke, 1981], est inaccessible pour des cas industriels. En effet, pour un cas 3D, le nombre de dimensions est de 8 ce qui porte à $10^{16}$ le nombre d'éléments à étudier pour une discrétisation de 100 éléments par dimension. Des cas d'études académiques existent cependant et sont présentés dans [O'Rourke, 1981]. Un cas d'étude réduit à une seule dimension d'espace est proposé dans [Creta et al., 2008] pour une application moteur. Les autres méthodes eulériennes se basent sur la réduction de l'espace des phases via l'utilisation des équations sur les moments décrivant l'évolution de quantités globales de la NDF.

#### 4.1.2.1 Principe des méthodes de moments

Dans la plupart des cas, la connaissance complète de la description cinétique du spray n'est pas nécessaire. Aussi, l'étude de quantités globales, les moments de la NDF, offre un niveau de description suffisant. Rappelons que, pour une fonction arbitraire $\psi(y)$, le moment $m_k$ d'ordre $k$ est

défini par :

$$m_k = \int y^k \psi(y) \mathrm{d}y \tag{4.5}$$

Le moment de la NDF, noté $\mathcal{M}_{l,n,i,j,k}$, est d'ordre $l$ en taille, $n$ en température et $(i,j,k)$ en vitesse et s'exprime de la façon suivante :

$$\mathcal{M}_{l,n,i,j,k} = \int_S \int_T \int_{\mathbf{u}} S^l T^n u_x^i u_y^j u_z^k \, f(t,\mathbf{x},\mathbf{u},T,S) \, \mathrm{d}\mathbf{u}\mathrm{d}T\mathrm{d}S \tag{4.6}$$

L'évolution de quantités globales décrivant le spray s'obtient par la dérivation d'équations sur les moments obtenues à partir de l'équation cinétique :

$$\int_S \int_T \int_{\mathbf{u}} S^l T^n u_x^i u_y^j u_z^k \, \mathrm{Eq.}(4.1) \, \mathrm{d}\mathbf{u}\mathrm{d}T\mathrm{d}S \tag{4.7}$$

Cette étape de dérivation introduit une perte d'information à moins de connaître une infinité de ces moments. De plus, à moins de poser une hypothèse appropriée, le système d'équations sur les moments n'est pas fermé même si l'équation cinétique l'est. Par exemple, pour les équations sur les moments en vitesse, l'équation du moment d'ordre $p$ (défini par $p = i + j + k$) nécessite d'étudier les moments d'ordre $p+1$. Dans ce cas précis, l'étude du moment $\mathcal{M}_{0,0,1,0,0}$ passe donc par celle des moments $\mathcal{M}_{0,0,2,0,0}$, $\mathcal{M}_{0,0,1,1,0}$ et $\mathcal{M}_{0,0,1,0,1}$. Des hypothèses sur la forme de la NDF doivent être établies afin de fermer le système de moments. Il existe deux familles de méthodes qui se distinguent par la façon de fermer le système.
Pour la première famille, la stratégie repose sur une représentation continue de la NDF en suivant deux étapes :

- Des distributions présumées en vitesse et en température pour chaque taille de particules permettant la dérivation d'un système intermédiaire d'équations de conservations, appelé système semi-cinétique, introduit dans [de Chaisemartin, 2009] à partir de [Laurent and Massot, 2001].

- La seconde étape repose sur le traitement de l'espace des tailles via une des différentes méthodes et fermetures qui aboutit à l'obtention d'un système final d'équations de conservation.

Une seconde famille de méthodes repose sur une dérivation du système d'équations soit en réalisant un échantillonnage de la distribution en taille, c'est la méthode Multi-Classe que nous présentons plus en détails dans §4.1.3, soit en utilisant une technique de quadratures pour décrire la forme de la NDF conservant un couplage complet entre les variables taille, vitesse et température. Ces méthodes de quadrature ne sont pas traités ici ; un descriptif des approches QMOM [Marchisio et al., 2003] et DQMOM (acronyme anglais pour Quadrature Moment Method et Direct Quadrature Moment Method) ainsi que des études numériques menées dans le cadre de sprays coalescents et réactifs sont donnés dans [Marchisio and Fox, 2005; Fox et al., 2008].
Dans le cadre de cette thèse, nous étudions la première catégorie de méthodes eulériennes dont le point clé est le conditionnement de la NDF par la variable taille.

#### 4.1.2.2 Dérivation du système semi-cinétique basé sur un conditionnement de la NDF par la variable taille

Au niveau cinétique, le choix de modélisation porte sur une représentation de la NDF pour les variables vitesse et température conditionnées par la taille menant ainsi à la résolution de corrélations taille/vitesse et taille/température. La NDF s'écrit alors en fonction de distributions en vitesse et en température :

$$f(t,\mathbf{x},\mathbf{u},T,S) = n(t,\mathbf{x},S)\Phi_{\mathbf{u}}(t,\mathbf{x},\mathbf{u},S)\Phi_T(t,\mathbf{x},T,S) \tag{4.8}$$

où $\Phi_{\mathbf{u}}$ et $\Phi_T$ sont respectivement les distributions en vitesse et en température, supposées indépendantes respectivement de la température et de la vitesse. La grandeur $n$ représente la concentration en nombre du spray et s'écrit :

$$n = \int_T \int_{\mathbf{u}} f(t,\mathbf{x},\mathbf{u},T,S) \, \mathrm{d}\mathbf{u}\mathrm{d}T \tag{4.9}$$

Les distributions en vitesse et en température s'établissent à partir de valeurs moyennes de vitesse et de température, respectivement notées $\overline{\mathbf{u}}$ et $\overline{T}$. La NDF s'écrit alors :

$$f(t,\mathbf{x},\mathbf{u},T,S) = n(t,\mathbf{x},S)\psi_{\mathbf{u}}(\mathbf{u} - \overline{\mathbf{u}}(t,\mathbf{x},S))\psi_T(T - \overline{T}(t,\mathbf{x},S)) \tag{4.10}$$

où $\psi_{\mathbf{u}}$ et $\psi_T$ sont respectivement les distributions définies autour des valeurs moyennes. Notons qu'à ce niveau de modélisation, ces valeurs moyennes $\overline{\mathbf{u}}$ et $\overline{T}$ ne dépendent que de la variable taille à un instant et une position donnés. Considérant les moments d'ordre 0, d'ordre 1 en vitesse et en température, nous établissons finalement le système semi-cinétique suivant :

$$\begin{cases} \partial_t n + \partial_{\mathbf{x}}(n\overline{\mathbf{u}}) &= \partial_S(n\overline{\mathrm{K}}) \\ \partial_t(n\overline{\mathbf{u}}) + \partial_{\mathbf{x}}(n\overline{\mathbf{u}}\otimes\overline{\mathbf{u}} + \mathbf{P}) &= \partial_S(n\overline{\mathrm{K}\mathbf{u}}) + n\overline{\mathbf{F}} \\ \partial_t(n\overline{e}) + \partial_{\mathbf{x}}(n\overline{e}\overline{\mathbf{u}}) &= \partial_S(n\overline{\mathrm{K}e}) + n\overline{\mathrm{H}} \end{cases} \tag{4.11}$$

où $\overline{e}$ est la concentration en énergie interne. La dérivation d'une équation sur l'énergie interne plutôt que sur la température se justifie car l'énergie est une variable conservative. Une équation sur l'enthalpie peut être établie mais elle est équivalente à celle sur l'énergie interne sur la base d'un choix de modélisation justifié dans §2.3.3. La température moyenne $\overline{T}$ est calculée à partir de la concentration en énergie moyenne $\overline{e}$. D'une manière plus globale, les quantités moyennes obtenues dans les différentes équations du modèle semi-cinétique et notées $\overline{(.)}$ sont définies par :

$$\forall\phi,\quad \overline{\phi} = n^{-1}\int_T\int_{\mathbf{u}}\phi f\,\mathrm{d}\mathbf{u}\mathrm{d}T = \int_T\int_{\mathbf{u}}\phi\,\psi_{\mathbf{u}}(\mathbf{u}-\overline{\mathbf{u}})\psi_T(T-\overline{T})\,\mathrm{d}\mathbf{u}\mathrm{d}T \tag{4.12}$$

Notons que cette équation n'est a priori pas applicable pour la température moyenne $\overline{T}$ sauf pour des situations où la capacité calorifique massique des gouttes est constante [Doisneau et al., 2013]. Le terme $\mathbf{P}$ est un tenseur équivalent à un terme de pression qui caractérise la dispersion en vitesse des gouttes. Son expression est la suivante :

$$\mathbf{P} = \int_T\int_{\mathbf{u}} n\,\psi_{\mathbf{u}}(\mathbf{u}-\overline{\mathbf{u}})\psi_T(T-\overline{T})\,(\mathbf{u}-\overline{\mathbf{u}})\otimes(\mathbf{u}-\overline{\mathbf{u}})\,\mathrm{d}\mathbf{u}\mathrm{d}T \tag{4.13}$$

Ainsi, la détermination de ce terme et des autres grandeurs moyennes ne reposent que sur le choix de la forme des distributions en vitesse et en température. Ce point de modélisation est discuté dans §4.2.1.

#### 4.1.2.3 Stratégies de discrétisation de l'espace des tailles

A ce stade, il ne reste qu'à traiter l'espace des tailles. Deux catégories de méthodes sont possibles :

– **L'approche bifluide** basée sur une intégration globale de l'espace des tailles et du modèle semi-cinétique est réalisée en intégrant en $S$ l'Eq.(4.11). Un système d'équations de conservation est obtenu :

$$\begin{cases} \partial_t n + \partial_{\mathbf{x}}.(n\overline{\mathbf{u}}) &= 0 \\ \partial_t(\rho_l\alpha_l) + \partial_{\mathbf{x}}.(\rho_l\alpha_l\overline{\mathbf{u}}) &= -\dot{m}_l \\ \partial_t(\rho_l\alpha_l\overline{\mathbf{u}}) + \partial_{\mathbf{x}}.(\rho_l\alpha_l\overline{\mathbf{u}}\otimes\overline{\mathbf{u}}) &= -\dot{m}_l\overline{\mathbf{u}} + \mathbf{F}_\mathrm{l} \\ \partial_t(\rho_l\alpha_l\overline{e}) + \partial_{\mathbf{x}}.(\rho_l\alpha_l\overline{e}\overline{\mathbf{u}}) &= -\dot{m}_l\overline{e} + \mathrm{H}_l \end{cases} \tag{4.14}$$

où $\rho_l$ est la masse volumique du liquide, $\alpha_l$ est la fraction volumique de la phase dispersée. Les termes $\dot{m}_l$, $\mathbf{F}_\mathrm{l}$ et $\mathrm{H}_l$ sont respectivement le flux d'échange de masse dû à l'évaporation, le terme d'échange de quantité de mouvement et le transfert de chaleur. Ils sont obtenus par intégration sur tout l'espace des tailles des termes sources du modèle semi-cinétique.
Ce modèle bifluide ne considère aucune dispersion en vitesse et en température. Le spray est alors décrit par une seule taille, vitesse et énergie moyennes, uniquement dépendantes du temps et de la position. Au final, un seul système fluide d'équations de conservation est obtenu ; il est couplé via ses termes sources à un système d'équations de conservation représentant la phase gazeuse. Le rayon moyen du spray est défini par :

$$\overline{r} = \left(\frac{3\alpha_l}{4\pi n}\right)^{\frac{1}{3}} \tag{4.15}$$

Ce modèle a notamment été étudié dans [Drew and Passman, 1999; Chanteperdrix et al., 2002; Murrone and Guillard, 2005]. Nous n'utilisons pas cette approche dans le cadre de nos études car l'information sur la dispersion en taille est perdue ce qui constitue une limitation forte.

– **L'approche Multi − Fluide** basée sur une discrétisation continue de l'espace des tailles. Cette stratégie est la base des méthodes Multi-Fluides ou sectionnelles qui assurent une représentativité de la distribution en taille du spray par la dérivation de systèmes d'équations de type fluide par gamme de taille discrétisée, appelée section. Une hiérarchie de méthodes existe et repose sur le choix de corrélations taille/vitesse et taille/température à résoudre pour chaque section. De plus, le niveau de description de la polydispersion dépend de l'utilisation d'un certain nombre de moments en taille. Ces méthodes, aptes à décrire la polydispersion d'un spray, sont donc choisies dans le cadre de ce travail et sont détaillées dans §4.2.

### 4.1.3 Extension polydisperse de l'approche bifluide : La méthode Multi-Classe

Pour la description des sprays polydisperses et en parallèle de l'approche Multi-Fluide, une extension du modèle bifluide est envisageable. Cette approche, nommée méthode Multi-Classe (MC) (ou Sampling en anglais), consiste en un échantillonnage de la distribution en gardant une approche eulérienne. La NDF est approximée par une somme de fonctions de Dirac comme illustré par la Fig.(4.1). Cette discrétisation de l'espace des phases est faite au travers de $\mathrm{N}_{\mathrm{sample}}$ classes (samples en anglais) pour certaines valeurs $\{S_1, ..., S_{\mathrm{N}_{\mathrm{sample}}}\}$ de l'espace des tailles pour lesquelles des vitesses moyennes $\mathbf{u}^{(k)}$ et des températures moyennes $T^{(k)}$ sont considérées :

$$f(t,\mathbf{x},\mathbf{u},T,S) = \sum_{k=1}^{\mathrm{N}_{\mathrm{sample}}} n^{(k)}(t,\mathbf{x})\,\delta(S - S_k(t,\mathbf{x}))\,\delta(\mathbf{u} - \mathbf{u}^{(k)}(t,\mathbf{x}))\,\delta(T - T^{(k)}(t,\mathbf{x})) \tag{4.16}$$

Pour chaque classe/sample, nous définissons la concentration en nombre de gouttes $n^{(k)}$ ainsi que la densité massique $m^{(k)} = n^{(k)}\,(\rho_l\, S_k^{3/2})/(6\sqrt{\pi})$. Il résulte $\mathrm{N}_{\mathrm{sample}}$ systèmes liquides d'équations de conservation couplés à un système pour la phase gazeuse :

$$\begin{cases} \partial_t n^{(k)} + \partial_{\mathbf{x}}.(n^{(k)}\mathbf{u}^{(k)}) & = 0 \\ \partial_t m^{(k)} + \partial_{\mathbf{x}}.(m^{(k)}\mathbf{u}^{(k)}) & = -\dot{m}^{(k)} \\ \partial_t (m^{(k)}\mathbf{u}^{(k)}) + \partial_{\mathbf{x}}.(m^{(k)}\mathbf{u}^{(k)} \otimes \mathbf{u}^{(k)}) & = -\dot{m}^{(k)}\mathbf{u}^{(k)} + \mathbf{F}^{(k)} \\ \partial_t (m^{(k)} e^{(k)}) + \partial_{\mathbf{x}}.(m^{(k)} e^{(k)}\mathbf{u}^{(k)}) & = -\dot{m}^{(k)} e^{(k)} + \mathrm{H}^{(k)} \end{cases} \tag{4.17}$$

où $\dot{m}^{(k)}$, $\mathbf{F}^{(k)}$ et $\mathrm{H}^{(k)}$ sont respectivement le terme de transfert de masse, la force de traînée et le terme d'échange de chaleur pour une classe de particules de taille $S_k$ de température $T^{(k)}$ et de vitesse $\mathbf{u}^{(k)}$.

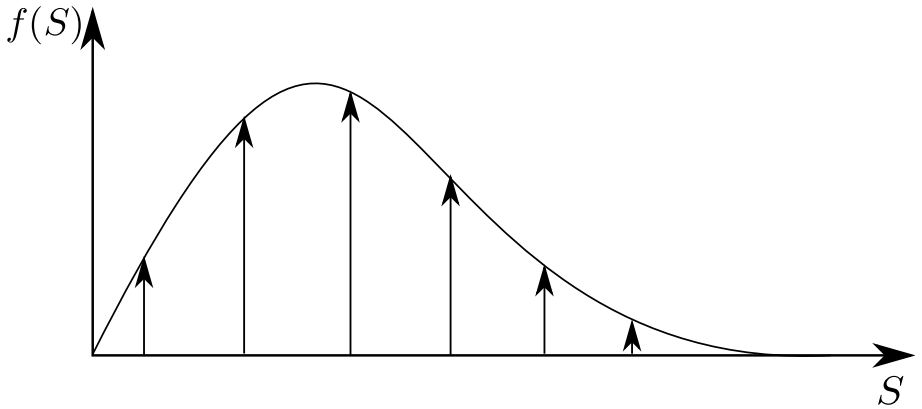


**FIGURE 4.1** – *Illustration de la méthode Multi-Classe*

Contrairement à l'approche continue en taille des méthodes Multi-Fluide (cf. §4.2.2), les interactions entre tailles de gouttes pour la description de phénomène tel que la coalescence sont particulièrement difficiles à prendre en compte. Les couplages entre les différentes classes mènent à de nombreux problèmes numériques tels que la création de nouvelles tailles de particules dont l'apparition n'est pas possible à prendre en compte à coût modéré le plus souvent.

En propulsions liquide et solide, la méthode MC a déjà été employée pour des calculs diphasiques réactifs dans le contexte d'étude d'instabilités moteur [Lupoglazoff et al., 2002; Gallier and Godfroy, 2009] et récemment exploitée dans le code CEDRE [Murrone and Villedieu, 2011; Le Touze et al., 2013]. Prise ici comme méthode eulérienne de référence pour les simulations diphasiques mettant en jeu des modèles d'évaporation ou de combustion avancés, la méthode MC est utilisée pour effectuer des calculs comparatifs et de validation pour les nouveaux développements réalisés pour les méthodes MF.
Il est à noter que la méthode MC est précise pour le suivi de l'évolution de distributions discrètes (multi-Dirac) mais s'avère moins efficace lorsque des distributions continues sont à représenter [Laurent and Massot, 2001]. Or, en propulsion solide, des distributions de type lognormale sont courantes.

## 4.2 Méthodes eulériennes Multi-Fluide ou sectionnelles

Nous présentons dans cette partie les deux principales étapes de dérivation des méthodes Multi-Fluides dont le principe a été introduit dans [Greenberg et al., 1993] et le formalisme fixé dans [Laurent and Massot, 2001] : 1- Le choix des fermetures pour les distributions en vitesse et en température du modèle semi-cinétique. 2- La discrétisation de l'espace des tailles et le niveau de description de la distribution en taille au sein des sections.

### 4.2.1 Choix de modélisation pour l'étape semi-cinétique : les fermetures sur la distribution en vitesse

#### 4.2.1.1 Fermeture monocinétique et expression des systèmes de gaz sans pression

Dans le cadre de cette thèse, nous utilisons des fermetures en vitesse et en température sur la base d'une approche monocinétique introduite dans [de Chaisemartin, 2009; Laurent and Massot, 2001] :

[HV1] Pour $(t, \mathbf{x})$ et une taille de goutte $S$, il n'y a qu'une seule vitesse $\overline{\mathbf{u}}(t, \mathbf{x}, S)$ et la dispersion en vitesse est nulle dans toutes les directions.

[HT1] Pour $(t, \mathbf{x})$ et une taille de goutte $S$, il n'y a qu'une seule température $\overline{T}(t, \mathbf{x}, S)$ et la dispersion en température est nulle.

Le support de la NDF est donc réduit à un sous-espace à une dimension paramétrée par la variable taille. on l'écrit : $f(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}, T, S) = n(t, \mathbf{x}, S)\delta(\mathbf{u} - \overline{\mathbf{u}}(t, \mathbf{x}, S))\delta(T - \overline{T}(t, \mathbf{x}, S))$. On intègre l'équation cinétique de la manière suivante :

$$\int_e \int_{\mathbf{u}} \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{u} \\ e \end{pmatrix} \text{Eq. (4.1)} \, \mathrm{d}\mathbf{u}\mathrm{d}T \tag{4.18}$$

Au final, le système semi-cinétique est le suivant :

$$\begin{cases} \partial_t n + \partial_{\mathbf{x}}(n\overline{\mathbf{u}}) &= \partial_S(n\overline{\mathrm{K}}) \\ \partial_t(n\overline{\mathbf{u}}) + \partial_{\mathbf{x}}(n\overline{\mathbf{u}} \otimes \overline{\mathbf{u}}) &= \partial_S(n\overline{\mathrm{K}}\overline{\mathbf{u}}) + n\overline{\mathbf{F}} \\ \partial_t(n\overline{e}) + \partial_{\mathbf{x}}(n\overline{e}\overline{\mathbf{u}}) &= \partial_S(n\overline{\mathrm{K}}\overline{e}) + n\overline{\mathrm{H}} \end{cases} \tag{4.19}$$

Si ce modèle a un formalisme proche des systèmes hyperboliques tels que les équations d'Euler, l'absence d'un terme de pression rend le système faiblement hyperbolique. On parle alors de systèmes de gaz sans pression (Pressureless Gas Dynamics en anglais avec PGD pour acronyme). La différence entre l'hyperbolicité et l'hyperbolicité faible repose sur l'expression de la matrice jacobienne. Cette dernière n'est pas diagonalisable dans le cas faiblement hyperbolique. Pour ces systèmes, il n'est pas possible de décrire une propagation acoustique. Aussi, le choix d'une seule vitesse, par taille de gouttes et pour une position donnée, rend impossible la description des croisements homo-PTC [de Chaisemartin, 2009] et entraine de fortes concentrations locales en gouttes appelées "delta-shock" ou "$\delta$-shock" comme illustré en Fig.(4.2). Dans ce cas précis, l'énergie cinétique des particules n'est pas conservée.
L'absence de terme de pression est aussi une cause de création de vide car elle ne permet pas la dispersion des particules générant ainsi des zones de vide en plus des "$\delta$-shock" déjà cités. En effet, les structures hydrodynamiques du gaz tendent à ségréguer les gouttes via le terme de force de traînée ; la concentration des gouttes devient fortement non uniforme et conduit à la formation de singularités en temps fini. Du point de vue de la modélisation, on parle alors de fluide hypercompressible. La possibilité de rencontrer dans l'écoulement de forts gradients de concentrations de gouttes et des zones de vide impose d'utiliser des schémas de transport à la fois robustes et précis pour traiter ces fortes concentrations locales et rester positif. Nous présentons ainsi ces méthodes dédiées dans §7.2.

#### 4.2.1.2 Stratégie de traitement des croisements de trajectoires homo-PTC

Pour l'étude des particules inertielles (cf. §3.1.2.4), des croisements de trajectoires de particules peuvent se produire. Ainsi, à une position donnée et pour une certaine taille, la distribution en vitesse est multi-valuée menant à des croisements dits homo-PTC. Des méthodes prenant en compte

une pression particulaire [Simoes et al., 2005; Simoes, 2006] ont été suggérées et appliquées sur des configurations d'écoulements au sein de MPS. Plus récemment, des fermetures spécifiques, parfaitement posées mathématiquement, ont été proposées afin d'apprécier la forme de la distribution en vitesse. Une méthode de moments basée sur une fermeture Gaussienne en vitesse a été développée dans [Vié et al., 2015]. Deux variantes ont été étudiées : La première repose sur une fonction Gaussienne Anisotrope (Anisotropic Gaussian en anglais avec AG pour acronyme). Elle s'exprime de la manière suivante :

$$\psi_{\mathbf{u}}(\mathbf{u}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}\left\|\sum\right\|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{u})^t \sum^{-1}(\mathbf{u})\right) \tag{4.20}$$

où $\sum = n^{-1}\int (\mathbf{u}-\overline{\mathbf{u}})\otimes(\mathbf{u}-\overline{\mathbf{u}})\, f \mathrm{d}\mathbf{u}$. La seconde technique consiste à prendre une fonction de distribution Gaussienne Isotrope (Isotropic Gaussian en anglais avec IG pour acronyme). Dans ce cas précis, nous avons $\sum = \sigma\mathbf{I}$. Finalement, une intégration de l'équation cinétique Eq.(4.1) sur l'espace des phases en vitesse conduit à la dérivation d'un système d'équations de conservation sur des moments en vitesse d'ordre 0 à 2. Il a été démontré que ce système est hyperbolique et admet une entropie [Berthon, 2006] ce qui laisse la possibilité d'utiliser une grande variété de schémas numériques. Dans le cas des sprays, on s'intéresse plus particulièrement aux situations de vide et d'accumulation de particules. Dans [Vié et al., 2015], un schéma de transport d'ordre 2 de type MUSCL/HLL a été mis en place et a démontré son efficacité sur des cas d'homo-PTC. Illustrée en Fig.(4.2), l'approche Gaussienne anisotrope s'est montrée la plus pertinente dans la mesure où elle reproduit plus fidèlement la dynamique des croisements à grande échelle alors que la fermeture IG présente une redistribution isotrope de l'énergie de croisement.

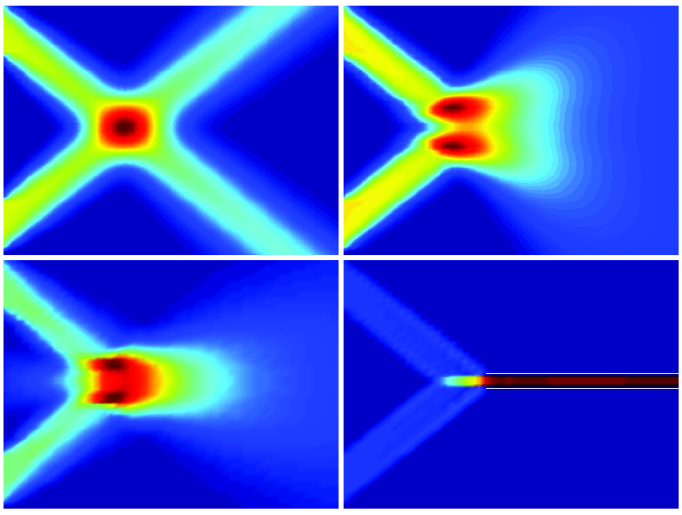

**FIGURE 4.2** – *Simulation d'un croisement de particules de même taille dans le cas $Kn = +\infty$ pour illustrer un cas d'homo-PTC à grande échelle. En haut-gauche : QMOM avec des moments d'ordre 0 et 3, en haut-droit : Gaussien Anisotrope, en bas-gauche : Gaussien Isotrope et en bas-droite : Monocinétique* ©*Doisneau*

En propulsion solide, les gouttes inertielles, présentant des nombres de Stokes particulièrement élevés, sont issues de la coalescence des résidus d'alumine au sein de la chambre. Les plus grosses d'entre elles sont susceptibles d'être concernées par tous les types de PTC comme illustré dans la Fig.(4.3). Des situations de PTC dits à petite échelle peuvent apparaître avec la turbulence même si ce phénomène n'est pas systématique. Dans le cadre de cette thèse, nous nous intéressons à la zone de combustion distribuée où les croisements de trajectoires sont limités car ils se produisent essentiellement au centre de la chambre et au niveau de la tuyère ; nous n'adoptons donc pas les approches Gaussiennes dans la suite de ce travail. De plus, de nouvelles méthodes numériques dédiées restent à construire pour le transport sur des maillages non structurés ainsi que pour des sprays coalescents et évaporants. Des travaux sont en cours dans [Dupif, 2017] et viennent en compléments des développements présentés dans ce travail.
Dans la partie suivante, nous exposons la seconde étape de dérivation des méthodes Multi-Fluides dans le contexte de l'approche monocinétique.

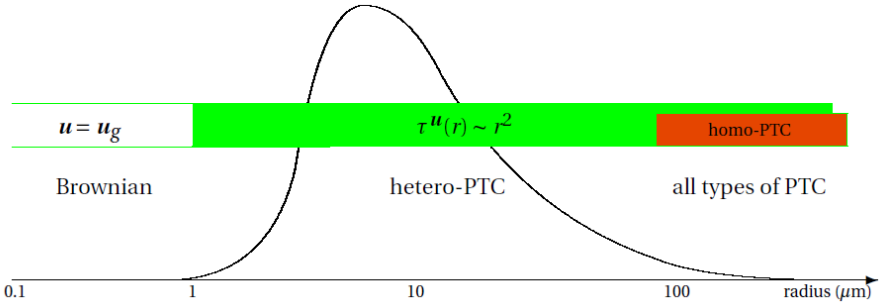


**FIGURE 4.3** – *Régimes de la phase dispersée fonction de la granulométrie communément rencontrée en propulsion solide ©Doisneau*

### 4.2.2 Hiérarchie des méthodes Multi-Fluides à plusieurs moments en taille en approche monocinétique

La seconde étape pour la dérivation des méthodes Multi-Fluide (MF) est basée sur une discrétisation de type Volumes Finis de l'espace des tailles : $0 = S_0 < ... < S_{\mathrm{N_{sec}}} = \infty$. Un système moyenné d'équations de conservation est obtenu pour chaque intervalle de tailles $[S_{k-1}, S_k[$ appelé section. L'ensemble des particules d'une section est traité comme un fluide régi par des équations de conservation, échangeant de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie avec les autres sections et avec le gaz. Pour fermer le système, trois hypothèses sont nécessaires. La première est :

[HS1] Dans chaque section, la forme de $n$ peut être présumée et exprimée comme une fonction de $S$.

Cette hypothèse fondamentale mène au choix du profil d'une fonction de forme présumée $\kappa^{(k)}$ dans chaque section et pour $(t, \mathbf{x})$ :

$$n(t, \mathbf{x}, S) \approx \sum \kappa^{(k)}(t, \mathbf{x}, S)\, \mathbb{1}_{[S_{k-1}, S_k[}(S) \tag{4.21}$$

Pour un couple $(t, \mathbf{x})$, le profil de la distribution en taille dans une section est déduit d'un ensemble de moments sur la taille $S$. Dans l'approche proposée dans [Laurent and Massot, 2001], référence de la méthode dite à un moment en taille ou One Size Moment en anglais (OSM-MF), une forme fixe est utilisée dans chaque section. Cette approche conduit à une convergence d'ordre 1 en nombre de sections pour la représentation de la NDF [Laurent, 2006]. Pour l'étude des phénomènes sur les changements de taille telles l'évaporation et la coalescence, un nombre plus élevé de moments en taille est privilégié afin de décrire plus précisément l'évolution de la distribution. Des méthodes de moments d'ordre plus élevé ont été développées pour améliorer la qualité de la description du profil en taille dans les sections ce qui implique plus de paramètres pour la reconstruction. Le nombre de ces paramètres détermine le nombre de moments. Des méthodes MF à deux moments en taille ou Two Size Moment (TSM-MF) ont été proposées dans [Dufour, 2005; Laurent, 2006] et l'une d'elles a été étudiée dans [Doisneau, 2013; Doisneau et al., 2013] pour les sprays coalescents. Une méthode à quatre moments ou EMSM (pour Eulerian Multi Size Moment) a également été développée dans [Massot et al., 2010a; Kah et al., 2012]. Le lien entre le nombre de moments et la précision de la reconstruction a été étudié dans [Vié et al., 2013].
Quel que soit le nombre de moments en taille, deux hypothèses sont requises sur la vitesse et la température pour fermer les modèles MF :

[HV2] Dans chaque section, la vitesse ne dépend pas de la taille des gouttes, on écrit alors : $\overline{\mathbf{u}}(t, \mathbf{x}, S) = \mathbf{u}^{(k)}(t, \mathbf{x})$.

[HT2] Dans chaque section, la température ne dépend pas de la taille des gouttes, on écrit alors : $\overline{T}(t, \mathbf{x}, S) = T^{(k)}(t, \mathbf{x})$. Cette hypothèse équivaut également à considérer une énergie constante dans la section $k$ : $e(t, \mathbf{x}, S) = \overline{e}^{(k)}(t, \mathbf{x}) = e(T^{(k)}(t, \mathbf{x}))$.

#### 4.2.2.1 OSM

Dans cette approche, un moment en taille est considéré dans chaque section et la distribution en taille est présumée dans la section, ici constante comme illustré en Fig.(4.4).
Les gouttes étudiées sont supposées sphériques, leur volume est : $Vol(S) = \rho_l S^{3/2}/(6\sqrt{\pi})$. Nous utilisons alors le moment d'ordre 3/2, noté $m^{(k)}$, qui représente la concentration massique de la

section $k$ :

$$m^{(k)}(t,\mathbf{x}) \approx \frac{\rho_l}{6\sqrt{\pi}} \int_{S_{k-1}}^{S_k} S^{3/2} n(t,\mathbf{x},S)\mathrm{d}S \tag{4.22}$$

La forme de la distribution présumée est fixe : $\kappa^{(k)}(t,\mathbf{x},S) = m^{(k)}(t,\mathbf{x})\overline{\kappa}^{(k)}(S)$ avec la condition de normalisation suivante :

$$\int_{S_{k-1}}^{S_k} \frac{\rho_l S^{3/2}}{6\sqrt{\pi}} \overline{\kappa}^{(k)}(S)\mathrm{d}S = 1 \tag{4.23}$$

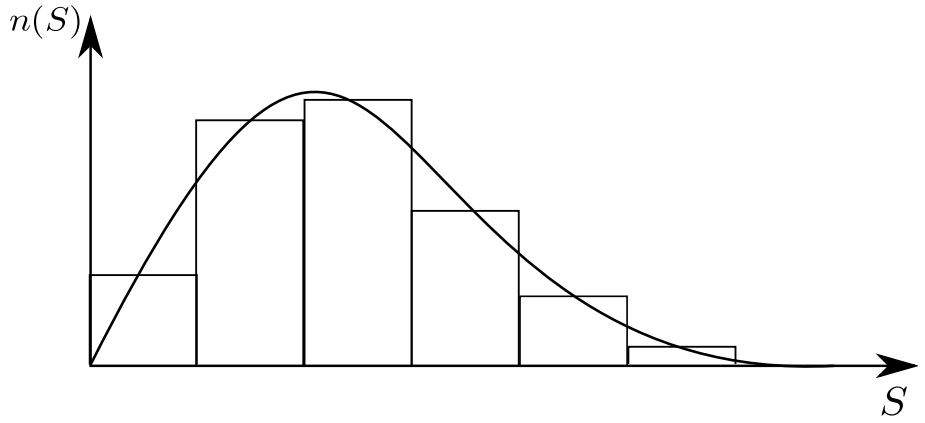


**FIGURE 4.4** – *Illustration de la méthode MF à un moment en taille OSM*

Le modèle Multi-Fluide est intégré à partir du système semi-cinétique de la manière suivante :

$$\int_{S_{k-1}}^{S_k} \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{u} \\ h \end{pmatrix} \text{Eq. (4.19)}\, \mathrm{d}S \tag{4.24}$$

Nous obtenons le système d'équations de conservation pour la section $k$ :

$$\begin{cases} \partial_t m^{(k)} + \partial_{\mathbf{x}}.(m^{(k)}\mathbf{u}^{(k)}) & = \left(\mathcal{E}^{(k+1)} - \mathcal{E}^{(k)}\right) & - \mathrm{M}^{(k)} \\ \partial_t (m^{(k)}\mathbf{u}^{(k)}) + \partial_{\mathbf{x}}.(m^{(k)}\mathbf{u}^{(k)} \otimes \mathbf{u}^{(k)}) & = \left(\mathcal{E}^{(k+1)}\mathbf{u}^{(k+1)} - \mathcal{E}^{k}\mathbf{u}^{(k)}\right) & - \mathrm{M}^{(k)}\mathbf{u}^{(k)} + \mathbf{F}^{(k)} \\ \partial_t (m^{(k)}h^{(k)}) + \partial_{\mathbf{x}}.(m^{(k)}h^{(k)}\mathbf{u}^{(k)}) & = \left(\mathcal{E}^{(k+1)}h^{(k+1)} - \mathcal{E}^{(k)}h^{(k)}\right) & - \mathrm{M}^{(k)}h^{(k)} + \mathrm{H}^{(k)} \end{cases} \tag{4.25}$$

Les méthodes MF sont caractérisées par deux catégories de termes sources :

**Termes d'échanges avec le gaz**
Les premiers représentent les termes d'échanges entre la phase gazeuse et une section : $\mathrm{M}^{(k)}$, $\mathbf{F}^{(k)}$ and $\mathrm{H}^{(\mathrm{k})}$. Comme ils ont lieu au sein d'une section, nous les nommons termes d'échanges intra-sectionnels.

**Flux d'échanges entre sections**
La seconde catégorie est celle des flux d'échanges entre sections. Dans le cas des sprays évaporants, le transfert de la concentration massique de la section $k$ à la section $(k-1)$ s'exprime grâce au terme $\mathcal{E}^{(k)}$. Notons que dans les cas de coalescence ou de fragmentation, des flux entre sections sont calculés et se distinguent des termes d'évaporation car ils ne correspondent pas à des échanges entre sections successives mais à des évolutions non locales de la distribution en taille. L'expression de ces termes et leur intégration sont détaillées dans [Laurent et al., 2004b; Doisneau, 2013].

#### 4.2.2.2 TSM

Les deux moments en taille pour les méthodes TSM-MF sont les moments $n^{(k)}$ d'ordre 0 qui est la concentration en nombre des gouttes et le moment $m^{(k)}$ d'ordre 3/2 pour la concentration massique. La forme présumée $\kappa^{(k)}$ doit alors vérifier :

$$n^{(k)}(t,\mathbf{x}) = \int_{S_{k-1}}^{S_k} \kappa^{(k)}(t,\mathbf{x},S)\mathrm{d}S, \qquad m^{(k)}(t,\mathbf{x}) = \frac{\rho_l}{6\sqrt{\pi}} \int_{S_{k-1}}^{S_k} S^{3/2}\kappa^{(k)}(t,\mathbf{x},S)\mathrm{d}S \tag{4.26}$$

Cette méthode comporte deux difficultés : il faut assurer la positivité de la fonction de distribution et préserver l'espace des moments, c'est-à-dire que les moments $n^{(k)}$ et $m^{(k)}$ dans chaque section doivent respecter la condition de réalisabilité suivante :

$$\begin{cases} n^{(k)} = 0, \qquad m^{(k)} = 0 \\ \qquad\qquad \text{ou} \\ n^{(k)} > 0, \qquad m^{(k)} > 0, \qquad n^{(k)} S_{k-1}^{3/2} < \dfrac{6\sqrt{\pi}}{\rho_l} m^{(k)} < n^{(k)} S_k^{3/2} \end{cases} \tag{4.27}$$

Autrement dit, une surface moyenne $\left(\frac{6\sqrt{\pi}}{\rho_l} m^{(k)}/n^{(k)}\right)^{2/3}$ doit être comprise entre les bornes de la section. Cette surface correspond au calcul d'un $S_{30}$, définie par l'Eq.(B.6) avec $p = 3$ et $q = 0$, pour chaque section. Une attention particulière est à porter sur le choix des stratégies numériques conduisant au calcul de la fonction de forme $\kappa^{(k)}$ (cf. §5.1).

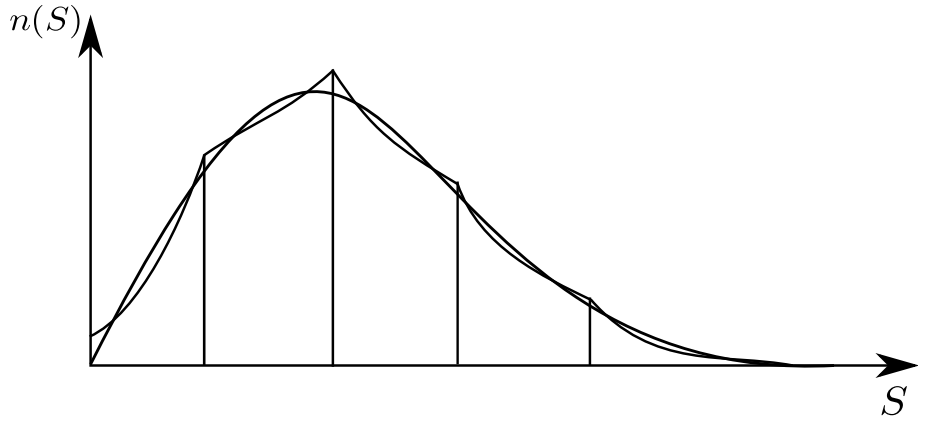


**FIGURE 4.5** – *Illustration de la méthode MF à deux moments en taille TSM*

Finalement, le système fluide de la méthode TSM-MF de la section $k$ se présente sous la forme suivante :

$$\begin{cases} \partial_t n^{(k)} + \partial_{\mathbf{x}}.(n^{(k)}\mathbf{u}^{(k)}) & = \mathcal{N}^{(k+1)} - \mathcal{N}^{(k)} \\ \partial_t m^{(k)} + \partial_{\mathbf{x}}.(m^{(k)}\mathbf{u}^{(k)}) & = \left(\mathcal{E}^{(k+1)} - \mathcal{E}^{(k)}\right) \qquad - \mathrm{M}^{(k)} \\ \partial_t (m^{(k)}\mathbf{u}^{(k)}) + \partial_{\mathbf{x}}.(m^{(k)}\mathbf{u}^{(k)} \otimes \mathbf{u}^{(k)}) & = \left(\mathcal{E}^{(k+1)}\mathbf{u}^{(k+1)} - \mathcal{E}^{k}\mathbf{u}^{(k)}\right) - \mathrm{M}^{(k)}\mathbf{u}^{(k)} + \mathbf{F}^{(k)} \\ \partial_t (m^{(k)}h^{(k)}) + \partial_{\mathbf{x}}.(m^{(k)}h^{(k)}\mathbf{u}^{(k)}) & = \left(\mathcal{E}^{(k+1)}h^{(k+1)} - \mathcal{E}^{(k)}h^{(k)}\right) - \mathrm{M}^{(k)}h^{(k)} + \mathrm{H}^{(k)} \end{cases} \tag{4.28}$$

Considérant $\mathrm{N_{sec}}$ systèmes fluides écrits avec le formalisme TSM-MF et $n_d$ dimensions pour la représentation de l'espace physique, nous avons $\mathrm{N_{sec}}(n_d + 3)$ équations de conservations. Pour chaque système liquide, les termes sources de masse, de quantité de mouvement et d'énergie sont obtenus en moyennant $\overline{\mathrm{K}}$, $\overline{\mathbf{F}}$ et $\overline{\mathrm{H}}$ sur les sections. Ces termes s'écrivent donc :

$$\mathcal{N}^{(k)} = \overline{\mathrm{K}}(S_{k-1})\,\kappa^{(k)}(S_{k-1}), \qquad\qquad \mathcal{E}^{(k)} = \frac{\rho_l\, S_{k-1}^{3/2}}{6\sqrt{\pi}}\,\mathcal{N}^{(k)}$$

$$\mathrm{M}^{(k)} = \frac{\rho_l}{6\sqrt{\pi}} \int_{S_{k-1}}^{S_k} \mathrm{d}_S(S^{3/2})\,\overline{\mathrm{K}}(S)\,\kappa^{(k)}(S)\mathrm{d}S, \tag{4.29}$$

$$\mathbf{F}^{(k)} = \frac{\rho_l}{6\sqrt{\pi}} \int_{S_{k-1}}^{S_k} S^{3/2}\,\overline{\mathbf{F}}(S)\,\kappa^{(k)}(S)\mathrm{d}S, \qquad\qquad \mathrm{H^{(k)}} = \frac{\rho_l}{6\sqrt{\pi}} \int_{S_{k-1}}^{S_k} S^{3/2}\,\overline{\mathrm{H}}(S)\,\kappa^{(k)}(S)\mathrm{d}S$$

Pour les méthodes TSM-MF, on retrouve les deux même familles de termes sources évoqués que celles évoquées dans l'approche OSM. Quelques différences sont notables :

**Termes intra-sectionnels pour les échanges avec le gaz**
Les termes intra-sectionnels d'échanges entre la phase gazeuse et une section s'expriment toujours via $\mathrm{M}^{(k)}$, $\mathbf{F}^{(k)}$ and $\mathrm{H^{(k)}}$. Cependant, ces termes intégraux sont plus complexes que pour la méthode OSM où la fonction de reconstruction $\kappa^{(k)}$ est constante. Le choix de la forme de cette fonction ainsi que l'intégration numérique des termes intégraux sont discutés dans §5.1.

**Termes d'échanges entre sections**
Pour les flux d'échanges entre sections, on retrouve les flux de concentration massique entre sections successives, notés $\mathcal{E}^{(k)}$. Pour les méthodes à deux moments en taille, les transferts de concentration en nombre de gouttes entre sections doivent être pris en compte. L'échange entre la section $k$ et la section $(k-1)$ est noté $\mathcal{N}^{(k)}$.

#### 4.2.2.3 EMSM

Dans cette approche considérée comme une méthode hybride [Massot et al., 2010a; Vié et al., 2013], les moments d'ordre entier de 0 à 3 sont pris en compte sur l'ensemble de la distribution, en ne considérant éventuellement qu'une seule section comme illustré dans la Fig.(4.6). Plusieurs sections peuvent être néanmoins utilisées. Les moments entiers sont définis par :

$$\int_0^{S_{max}} \begin{pmatrix} 1 \\ S \\ S^2 \\ S^3 \end{pmatrix} n(t,\mathbf{x},S)\mathrm{d}S \tag{4.30}$$

où $S_{max}$ est la plus grande taille de gouttes étudiée. En dehors des moments d'ordre 0 et d'ordre 1, les autres moments entiers de la distribution n'ont pas de sens physique. Par soucis de clarté, nous considérons que le taux d'évaporation $\overline{\mathrm{K}}$ est constant pour toutes les tailles et que l'échange de chaleur n'est pas pris en compte. Ainsi, en prenant le moment d'ordre 1 sur l'équation de quantité de mouvement du système semi-cinétique donné en Eq.(4.19), nous obtenons le système d'équations de conservation suivant :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \partial_t m_0 + \partial_{\mathbf{x}}.(m_0\mathbf{u}) & = -\overline{\mathrm{K}} n(S=0) \\ \partial_t m_1 + \partial_{\mathbf{x}}.(m_1\mathbf{u}) & = -m_0\overline{\mathrm{K}} \\ \partial_t m_2 + \partial_{\mathbf{x}}.(m_2\mathbf{u}) & = -2m_1\overline{\mathrm{K}} \\ \partial_t m_3 + \partial_{\mathbf{x}}.(m_3\mathbf{u}) & = -3m_2\overline{\mathrm{K}} \\ \partial_t(m_1\mathbf{u}) + \partial_{\mathbf{x}}.(m_1\mathbf{u}\otimes\mathbf{u}) & = -\overline{\mathrm{K}} m_0\mathbf{u} + m_0\overline{\mathbf{F}} \end{array} \right. \tag{4.31}$$

où $n(S=0)$ est un terme non fermé qui représente la concentration en nombre de gouttes qui disparaissent par évaporation. Le système ci-dessus a été étudié dans [Massot et al., 2010a; Kah et al., 2012] du point de vue de la modélisation et de sa structure mathématique. Il en est ressorti que les conditions de réalisabilité sont particulièrement complexes : le vecteur des moments $\mathbf{m} = (m_0, m_1, m_2, m_3)^t$ doit rester au sein de l'espace des moments $\mathcal{M}^3(0, S_{max})$ à chaque instant et à chaque position. Cet espace est convexe et présente une structure complexe sur $(\mathcal{R}^+)^3$.

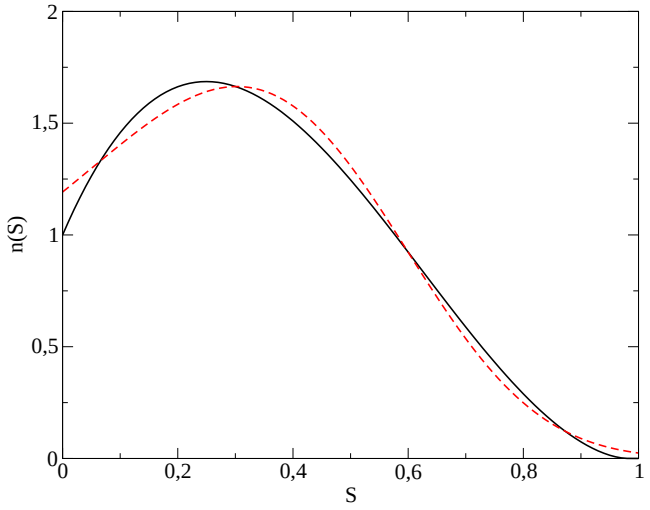


**FIGURE 4.6** – *Illustration de la méthode EMSM à quatre moments en taille, description de la distribution avec une seule section. Ligne continue : distribution exacte et ligne discontinue : distribution reconstruite*

Une stratégie de reconstruction de la NDF basée sur le principe de maximisation d'entropie (Maximum Entropy en anglais avec pour acronyme ME) a été établie dans [Massot et al., 2010a] afin de fournir une fermeture appropriée sur la concentration en nombre. De plus, des schémas numériques dédiés sont requis pour respecter la réalisabilité sur les moments à chaque changement de la distribution en taille. C'est le cas pour de l'évaporation et du transport dans l'espace physique. Des

méthodes numériques de type cinétique [Massot et al., 2010a; Kah et al., 2012] ont donc été développées dans cette optique. L'étude de la méthode EMSM est exposée en détails dans le contexte des simulations de sprays de carburant dans les chambres des moteurs à combustion interne [Kah, 2010; Emre, 2014]. Des travaux portant sur le couplage fort avec le gaz ainsi qu'une modélisation des interactions entre la phase dispersée et un écoulement turbulent y sont également présentés.
Dans la partie suivante, nous justifions le choix de la méthode eulérienne en fonction de critères propres à la physique des écoulements en propulsion solide mais aussi de contraintes liées aux simulations industrielles.

### 4.2.3 Choix de l'approche TSM-MF pour les applications propulsion solide

#### 4.2.3.1 Compromis coût/précision et flexibilité de la méthode à deux moments en taille

Comme expliqué dans §3.1.2, la dynamique du spray est fortement conditionnée par la taille. Pour les méthodes MF, elle résulte principalement du niveau de description de la distribution en taille sur chaque section. Les approches à un, deux ou quatre moments en taille conduisent respectivement à des convergences d'ordre un, deux ou quatre en nombre de sections pour la reconstruction de la NDF. Cependant les contraintes numériques augmentent avec le nombre de moments puisque les stratégies et les algorithmes numériques deviennent plus complexes à mettre en place. A nombre de sections fixé, le coût calcul de chaque méthode est aussi grandissant. L'objectif des méthodes utilisant un grand nombre de moments est donc l'emploi d'un nombre très peu élevé de sections, voire d'une seule section. La méthode EMSM est notamment employée dans [Emre, 2014] avec une seule section. Comme illustré dans la Fig.(4.6), la description de la polydispersion et de son évolution sont particulièrement bien pris en compte. Dans le cas de ces moteurs à pistons, il s'agit de gouttes d'hydrocarbures qui brûlent complètement.
En propulsion solide, nous cherchons à la fois à décrire fidèlement la phase de combustion mais aussi à suivre les résidus inertes au sein des structures tourbillonaires de l'écoulement interne. Dans ce cas précis, les échanges de quantité de mouvement et d'énergie doivent être correctement restitués. La polydispersion étant importante, le spectre des nombres de Stokes est étendu. Une discrétisation sectionnelle, de l'ordre d'une à deux sections pour l'approche EMSM, conduit à une restitution peu représentative de la distribution en vitesse de la phase dispersée à cause des hypothèses [HV2] et [HT2] données dans §4.2.2, ce qui nous contraint à considérer plus de sections. Utiliser un nombre élevé de moments et de sections est finalement très coûteux en terme de temps de calcul et inabordable pour des simulations sur des configurations moteurs. Nous privilégions ainsi les méthodes TSM-MF car elles offrent un compromis intéressant entre la précision du suivi de la distribution en taille et les contraintes imposées par l'utilisation d'un nombre modéré de sections. Pour l'étude des gouttes en évaporation, les études précédentes [Dufour, 2005; Laurent, 2006] étaient limitées à des transferts de masse pour lesquels le taux d'évolution est le même quelle que soit la taille des gouttes.
De plus, une des attentes numériques majeures en propulsion solide est de proposer des simulations combinant évaporation, coalescence et fragmentation. Le calcul des phénomènes d'interactions entre gouttes avec la méthode EMSM nécessite la mise en place de méthodes numériques particulières pour préserver les conditions de réalisabilité. Cela implique également d'utiliser plusieurs sections pour l'étude de la coalescence car il est nécessaire d'avoir des différentiels de vitesse. L'approche TSM-MF est moins contraignante et une forte contribution pour établir des stratégies d'intégration des termes sources de coalescence a été apportée récemment [Doisneau et al., 2013; Doisneau, 2013; Laurent et al., 2015].
Pour nos applications, les méthodes TSM-MF apparaissent comme le meilleur candidat pour les simulations industrielles mais elles nécessitent de nouveaux développements et validations ainsi que des schémas numériques dédiés pour l'intégration des termes intra-sectionnels et des termes de flux entre sections dans le contexte des modèles d'évaporation et de combustion avancés présentés dans les chapitres 2 et 3.

#### 4.2.3.2 Perspective d'amélioration sur les fermetures sectionnelles en vitesse

La validité des hypothèses [HV2] et [HT2], données dans §4.2.2, repose sur la gamme des temps caractéristiques que couvre une section. En comparant les nombres de Stokes des plus petites gouttes avec ceux des plus grandes au sein des sections, les fonctions de forme présumées constantes en vitesse et en température ne semblent plus appropriées. Comme cela est illustré dans la Fig.(4.7),

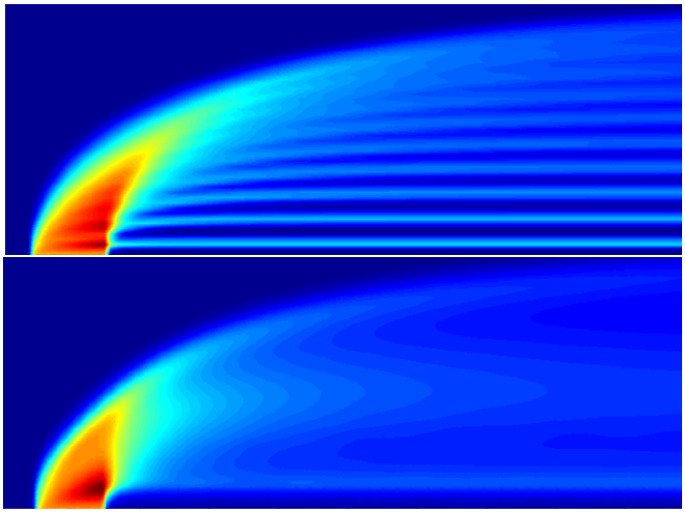

**Figure 4.7** – *Visualisation de la concentration de particules injectées de manière pariétale dans un écoulement gazeux. Comparaison de la méthode OSM-MF et un moment en vitesse avec 10 sections (en haut) et CSVM à quatre moments en taille et deux en vitesse (en bas)*

la répartition de la concentration en particules, obtenue avec la méthode MF et un seul moment d'ordre 1 en vitesse, présente une structure constante par morceau.

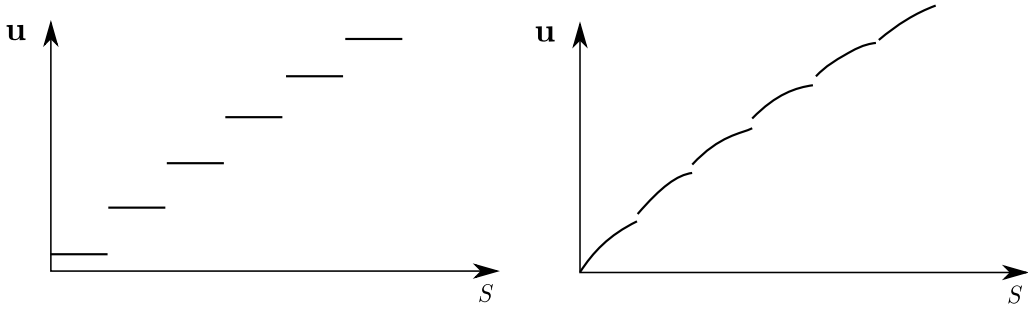


**Figure 4.8** – *Profil de vitesse dans les sections en fonction de l'hypothèse mono-vitesse ou l'approche CSVM*

Ainsi, une autre famille de méthodes MF reposant sur un couplage taille/vitesse a été développée, appelée Coupled-Size-Velocity Moment method (avec pour acronyme CSVM method) [Vié et al., 2013], qui propose des profils de vitesse non constants dans les sections comme présenté dans la Fig.(4.8). Ce développement a été réalisé dans un premier temps pour la méthode EMSM. D'excellents résultats ont été obtenus comme le montre la Fig.(4.7). Cette nouvelle approche a été écrite et suggérée pour la méthode TSM-MF dans [Doisneau, 2013] où elle est nommée CSVTSM pour Correlated Size-Velocity Two Size Moment.
Cependant, en plus des deux moments en taille de la méthode TSM, l'utilisation d'un plus grand nombre de moments en vitesse entraine une augmentation sensible du coût calcul. En effet, deux, quatre et six moments en vitesse sont transportés respectivement pour les cas 1D, 2D et 3D. Pour l'approche classique respectant les conditions [HV2] et [HT2], seulement un, deux et trois moments sont pris en compte pour les différents configurations. Finalement, nous n'utilisons pas la méthode CSVM dans le cadre de cette thèse. Notons qu'une approche similaire portant sur l'amélioration du profil de température a aussi été proposée dans [Doisneau, 2013]. Elle a pour objectif principal une meilleure description du chauffage des gouttes dont la dynamique est, tout comme la vitesse, fortement dépendante de la taille des gouttes.
Dans [Laurent et al., 2015], contribution fournie en Annexe D, nous proposons une méthode d'ordre deux en taille pour la description de la traînée et de la coalescence, sans utilisation de variable supplémentaire, basée sur une reconstruction type MUSCL sur la vitesse.

## Conclusion du chapitre 4

Dans ce chapitre, nous avons justifié du choix d'une stratégie eulérienne pour la résolution de l'équation cinétique qui offre un coût calcul indépendant du nombre de particules suivies et un formalisme adapté pour le couplage avec la phase gazeuse. Nous avons présenté les principales stratégies de dérivation des méthodes eulériennes en nous concentrant sur les méthodes de moments. L'accent est mis sur la description de la polydispersion dont dépend fortement la dynamique de la phase dispersée. La méthode Multi-Classe offre une première approche de la distribution en taille qui a démontré son efficacité dans de nombreuses simulations diphasiques réactives en propulsion solide. Cette modélisation est adaptée pour décrire les répartitions discrètes mais elle est limitée pour les cas d'interactions entre gouttes. Nous utilisons cependant la méthode MC pour valider nos développements dans le cadre des calculs applicatifs de la partie IV où les interactions de gouttes ne sont pas considérées. Les méthodes MF sont particulièrement bien adaptées pour décrire avec précision la polydispersion des distributions régulières ainsi que l'évolution de la granulométrie engendrée par des phénomènes de coalescence ou de fragmentation. Pour nos applications, nous avons justifié que l'approche TSM-MF est la méthode la plus pertinente car elle associe précision et flexibilité. Dans le chapitre suivant, nous présentons une amélioration majeure des méthodes TSM-MF qui assure une diminution significative du temps de calcul et une plus grande précision dans le calcul des termes sources.

# Chapitre 5

# Amélioration des méthodes TSM-MF et analyse de cette approche pour l'acoustique diphasique

*Dans le cadre des méthodes TSM-MF, la première partie de ce chapitre est consacrée à la présentation d'une nouvelle famille de fonctions de reconstruction de la distribution en taille au sein des sections. Ces dernières ont été dérivées de manière à respecter la positivité de la NDF. Le choix d'une fonction de forme exponentielle a donc été proposée. Cependant, le calcul coûteux des paramètres de cette fonction à partir des moments d'ordre 0 et 3/2, aussi appelée étape d'inversion, est apparu comme un frein à l'emploi des méthodes TSM dans le cadre de simulations industrielles. Cela nous a conduit à développer une nouvelle fonction de forme de la NDF basée sur une approche polynomiale : continue sur la section et affine sur un intervalle à déterminer. Le second thème d'étude de ce chapitre porte sur l'analyse des méthodes MF dans le contexte de l'acoustique diphasique linéaire. D'une part, cette partie illustre l'intérêt de choisir des méthodes MF d'ordre élevé pour décrire avec précision la polydispersion. D'autre part, les interactions entre l'acoustique de la chambre et une phase polydisperse constituent : 1- Un axe d'études majeur en propulsion solide. 2- Un cadre de validation adéquat pour la vérification numérique des couplages entre phases pour les solveurs diphasiques. Aussi, nous mettons en évidence l'importance de la polydispersion sur la réponse acoustique. Finalement, nous réalisons des études paramétriques autour des stratégies de discrétisation de l'espace des tailles et du choix de la reconstruction sectionnelle.*

## 5.1 Méthodes à deux moments en taille

Dans le cadre des méthodes TSM-MF, cette partie est consacrée à la définition de familles de fonctions de reconstruction $\kappa^{(k)}$ pertinentes qui assurent une relation bijective avec les moments d'ordre 0, i.e. $n^{(k)}$, et 3/2, i.e. $m^{(k)}$ telle que :

$$n^{(k)} = \int_{S_{k-1}}^{S_k} \kappa^{(k)}(S)\mathrm{d}S \qquad m^{(k)} = \frac{\rho_l}{6\sqrt{\pi}} \int_{S_{k-1}}^{S_k} S^{3/2}\kappa^{(k)}(S)\mathrm{d}S \tag{5.1}$$

On note : $\kappa^{(k)} = \Phi\left(n^{(k)}, m^{(k)}\right)$. On parle d'inversion pour l'étape consistant à déterminer la fonction de forme $\kappa^{(k)}$ à partir des moments. Cette procédure est caractéristique de l'approche MF car c'est sur elle que repose l'évaluation des termes d'échanges avec le gaz et entre les sections écrits en Eq.(4.29). Dans un premier temps, nous présentons la forme exponentielle introduite dans [Dufour, 2005] pour l'étude des sprays évaporants. Nous illustrons les points clés de l'étape d'inversion et les difficultés numériques associées. Puis, nous introduisons une nouvelle fonction de reconstruction basée sur une approche linéaire. Les améliorations apportées par la nouvelle reconstruction sont alors décrites et argumentées par rapport à la forme exponentielle.

### 5.1.1 Reconstruction exponentielle

#### 5.1.1.1 Présentation de la reconstruction

Afin d'assurer la positivité de la NDF, une reconstruction adaptée pour décrire le profil de la distribution en taille a été proposée dans [Dufour, 2005; Doisneau et al., 2013]. Celle-ci utilise une fonction de forme exponentielle :

$$\kappa^{(k)}(t,\mathbf{x},S) = a_k(t,\mathbf{x})\exp(-b_k(t,\mathbf{x})S), \quad S \in [S_{k-1}, S_k[ \tag{5.2}$$

Le choix de cette reconstruction conduit à déterminer les coefficients $a_k$ et $b_k$ tels que :

$$\begin{cases} a_k = \Phi_a\left(n^{(k)}, m^{(k)}\right) \qquad \text{avec} \qquad a_k \geq 0 \\ \\ b_k = \Phi_b\left(n^{(k)}, m^{(k)}\right) \end{cases} \tag{5.3}$$

où $\Phi_a$ et $\Phi_b$ sont deux fonctions bijectives. La fonction de reconstruction exponentielle a été développée en premier lieu car les approches linéaires proposées à l'époque, bien qu'en apparence plus simples, ne semblaient pas pouvoir assurer la positivité de la fonction de distribution. De plus, la forme exponentielle convient à la forme des queues de distributions comme observé dans [Laurent et al., 2004b].

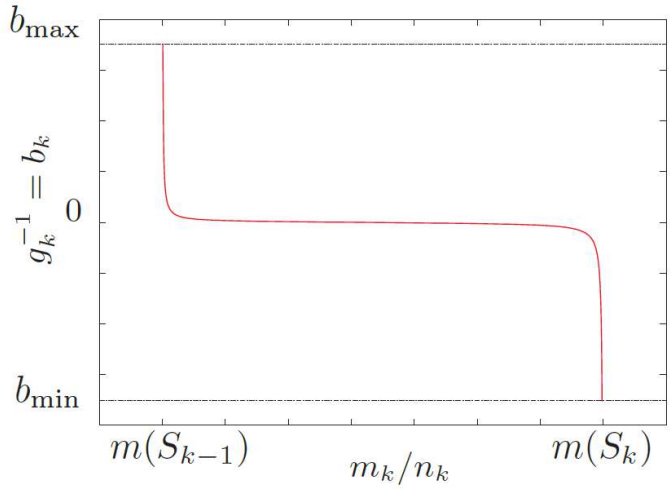


**FIGURE 5.1** – *Tracé de l'inverse de la fonction $g_k$ et de ses limites*

#### 5.1.1.2 L'étape d'inversion : Détermination des coefficients de la reconstruction à partir des moments d'ordre 0 et 3/2

A partir de l'expression des moments donnée en Eq.(5.1), il est possible d'établir les relations suivantes :

$$\begin{cases} b_k = g_k^{-1}\left(\dfrac{m^{(k)}}{n^{(k)}}\right) \\ \\ \begin{cases} a_k = \dfrac{n^{(k)}\, b_k}{\exp(-b_k S_{k-1}) - \exp(-b_k S_k)} & \text{si } b_k \neq 0 \\ \\ a_k = \dfrac{n^{(k)}}{S_k - S_{k-1}} & \text{si } b_k = 0 \end{cases} \end{cases} \tag{5.4}$$

où $a_k$ dépend de $b_k$ et de $n^{(k)}$ et le coefficient $b_k$ s'exprime par l'intermédiaire de l'inverse d'une fonction $g_k$ qui dépend finalement uniquement de $b_k$. Il existe une expression analytique de cette fonction [Dufour, 2005] mais celle-ci a une forme fortement non linéaire car elle combine des fonctions erreur $erf$ et de Dawson $daw$. Cette fonction est monotone et est caractérisée par :

$$\begin{cases} \lim\limits_{b_k \to -\infty} g_k(b_k) = \dfrac{\rho_l}{6\sqrt{\pi}}\, S_k^{3/2} \\ \\ \lim\limits_{b_k \to +\infty} g_k(b_k) = \dfrac{\rho_l}{6\sqrt{\pi}}\, S_{k-1}^{3/2} \end{cases} \tag{5.5}$$

Ces limites correspondent aux bornes de la section $k$. Ainsi, $g_k$ est une bijection de $\mathbb{R}$ vers $]\frac{\rho_l}{6\sqrt{\pi}}\,S_{k-1}^{3/2}, \frac{\rho_l}{6\sqrt{\pi}}\,S_k^{3/2}[$, elle est donc inversible, comme illustré en Fig.(5.1), ce qui permet d'affirmer que l'Eq.(5.4) a une unique solution. Dans le cadre de cette thèse, le choix s'est porté sur une méthode de Ridders [Press et al., 1992], basée sur une méthode itérative de la position fausse, car elle est réputée robuste et précise.

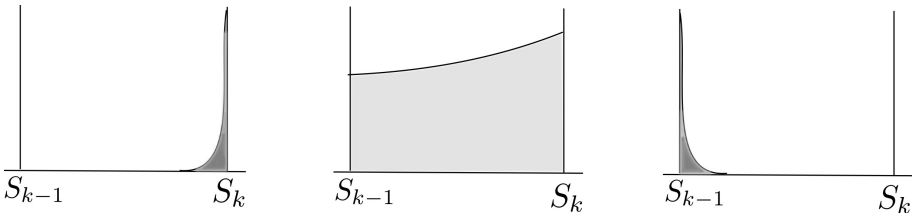


**FIGURE 5.2** – *Reconstruction exponentielle pour des cas de distributions raides (à gauche et à droite) et pour une reconstruction étendue (au milieu)*

Elle est cependant assez coûteuse car elle traite une fonction fortement non linéaire. De plus, à l'échelle de tout un calcul, elle est appelée pour toutes les sections, en tout point de l'espace et à tout pas de temps car la NDF est modifiée dès qu'il y a transport dans l'espace physique ou évolution dans l'espace des tailles suite à de l'évaporation par exemple.
Comme illustré dans la Fig.(5.2), une situation particulière sensible à traiter est rencontrée lorsque les distributions sont raides c'est-à-dire quand la répartition ou le diamètre moyen de la section $d_{30}^{(k)} = \left(6\sqrt{\pi}\,m^{(k)}/(\rho_l\,n^{(k)})\right)^{2/3}$ est très proche d'une borne de la section. Dans ce cas, la précision de la technique d'inversion chute et les limites machines peuvent être atteintes sur certains calculateurs. D'un point de vue de l'implémentation, le calcul de la fonction exponentielle, et plus spécifiquement de son exposant $b_k S$, est une limitation.

## 5.1.2 Apports de la nouvelle reconstruction affine

### 5.1.2.1 Principe d'une fonction affine par morceaux

Nous proposons dans [Laurent et al., 2015] (rappelons que cette contribution est fournie en Annexe D), une nouvelle reconstruction où la fonction de forme choisie pour décrire la NDF est continue sur la section, affine sur un intervalle de la section et nulle ailleurs :

$$\begin{aligned} &\kappa^{(k)}(t,\mathbf{x},S) = 0, \quad S \in [S_{k-1}, S_a] \quad \text{ou} \quad S \in [S_b, S_k[ \\ &\kappa^{(k)}(t,\mathbf{x},S) = \alpha_k + (\beta_k - \alpha_k)\frac{(S-S_a)}{(S_b-S_a)}, \quad S \in [S_a, S_b] \end{aligned} \tag{5.6}$$

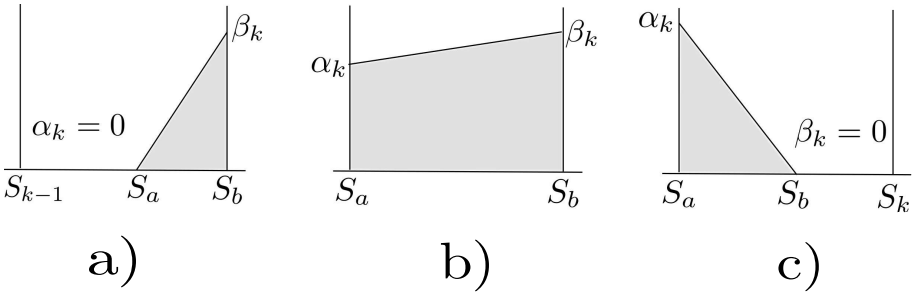


**FIGURE 5.3** – *Situations possibles pour la reconstruction affine respectant les conditions de réalisabilité*

Avec trois cas possibles, représentés en Fig.(5.3) :

$$\begin{cases} \text{a)} \quad \alpha_k = 0 \quad \text{et} \quad S_b = S_k \\ \text{b)} \quad S_a = S_{k-1} \quad \text{et} \quad S_b = S_k \\ \text{c)} \quad \beta_k = 0 \quad \text{et} \quad S_a = S_{k-1} \end{cases} \tag{5.7}$$

Ainsi, seuls deux paramètres restent à calculer dans chaque cas, à partir de $n^{(k)}$ et $n^{(k)}$ de sorte que l'Eq.(5.1) soit réalisée.
La reconstruction est parfaitement posée si la condition de réalisabilité donnée en Eq.(4.27). Le paragraphe suivant donne les détails de cette reconstruction.

#### 5.1.2.2 L'étape d'inversion : Avantage de la forme polynomiale par rapport à la forme exponentielle

Afin de respecter l'Eq.(5.1), la valeur des paramètres $\alpha_k$, $\beta_k$, $S_a$ et $S_b$ est obtenue par une stratégie dite d'inversion qui implique de différencier trois situations, comme illustré en Fig.(5.3), en fonction du rapport $m^{(k)}/n^{(k)}$.
Dans la mesure où les bornes des sections sont fixes, on introduit tout d'abord les quantités constantes suivantes :

$$\begin{cases} \Delta S_k = S_k - S_{k-1} \\ S_{5/2}^{(k)} = \frac{2}{5}\left(S_k^{5/2} - S_{k-1}^{5/2}\right) \\ S_{7/2}^{(k)} = \frac{2}{7}\left(S_k^{7/2} - S_{k-1}^{7/2}\right) \\ \mathrm{A_k} = S_k S_{5/2}^{(k)} - S_{7/2}^{(k)} \\ \mathrm{B_k} = S_{7/2}^{(k)} - S_{k-1} S_{5/2}^{(k)} \\ \mathrm{C_k} = \frac{1}{2}\left(\mathrm{B_k} - \mathrm{A_k}\right) \end{cases} \tag{5.8}$$

Alors que pour le cas b), une solution analytique est possible, les situations a) et c) reviennent à une situation similaire au cas exponentielle c'est-à-dire à l'inversion de deux fonctions bijectives $\Phi_{sa}$ et $\Phi_{sb}$ qui s'expriment sous la forme de polynômes dont nous cherchons l'unique racine réelle comme démontré dans [Laurent et al., 2015]. Pour chaque section, nous sommes amenés à étudier les fonctions suivantes :

$$\begin{cases} \Phi_{sa}^{(k)}\left(X, \dfrac{m^{(k)}}{n^{(k)}}\right) = & 2X^5 + 4\sqrt{S_k}X^4 + 6S_kX^3 + \left(8S_k^{3/2} - \dfrac{6\sqrt{\pi}}{\rho_l}\dfrac{35m^{(k)}}{4n^{(k)}}\right)X^2 \\ & + \left(10S_k^{3/2} - \dfrac{6\sqrt{\pi}}{\rho_l}\dfrac{35m^{(k)}}{2n^{(k)}}\right)\sqrt{S_k}X + \left(5S_k^{3/2} - \dfrac{6\sqrt{\pi}}{\rho_l}\dfrac{35m^{(k)}}{4n^{(k)}}\right)S_k \\ \Phi_{sb}^{(k)}\left(X, \dfrac{m^{(k)}}{n^{(k)}}\right) = & 2X^5 + 4\sqrt{S_{k-1}}X^4 + 6S_{k-1}X^3 + \left(8S_{k-1}^{3/2} - \dfrac{6\sqrt{\pi}}{\rho_l}\dfrac{35m^{(k)}}{4n^{(k)}}\right)X^2 \\ & + \left(10S_{k-1}^{3/2} - \dfrac{6\sqrt{\pi}}{\rho_l}\dfrac{35m^{(k)}}{2n^{(k)}}\right)\sqrt{S_{k-1}}X + \left(5S_{k-1}^{3/2} - \dfrac{6\sqrt{\pi}}{\rho_l}\dfrac{35m^{(k)}}{4n^{(k)}}\right)S_{k-1} \end{cases} \tag{5.9}$$

Aussi, les trois situations rencontrées sont définies de la manière suivante :

a) Pour $\dfrac{6\sqrt{\pi}}{\rho_l}m^{(k)} > \dfrac{2\,n^{(k)}\,\mathrm{B_k}}{\Delta S_k^2}$, nous avons :

$$\begin{cases} \Phi_{sa}^{(k)}\left(\sqrt{S_a}, \dfrac{m^{(k)}}{n^{(k)}}\right) = 0, \qquad S_b = S_k \\ \alpha_k = 0 \\ \beta_k = \dfrac{2n^{(k)}}{S_k - S_a} \end{cases} \tag{5.10}$$

b) Pour $\dfrac{2\,n^{(k)}\,\mathrm{A_k}}{\Delta S_k^2} \leq \dfrac{6\sqrt{\pi}}{\rho_l} m^{(k)} \leq \dfrac{2\,n^{(k)}\,\mathrm{B_k}}{\Delta S_k^2}$, nous avons :

$$\begin{cases} S_a = S_{k-1}, \qquad S_b = S_k \\ \alpha_k = \dfrac{\left(n^{(k)}\mathrm{B_k}/\Delta S_k - 3\sqrt{\pi}\, m^{(k)}\Delta S_k/\rho_l\right)}{\mathrm{C_k}} \\ \beta_k = \dfrac{\left(-n^{(k)}\mathrm{A_k}/\Delta S_k + 3\sqrt{\pi}\, m^{(k)}\Delta S_k/\rho_l\right)}{\mathrm{C_k}} \end{cases} \tag{5.11}$$

c) Pour $\dfrac{6\sqrt{\pi}}{\rho_l} m^{(k)} < \dfrac{2\,n^{(k)}\,\mathrm{A_k}}{\Delta S_k^2}$, nous avons :

$$\begin{cases} S_a = S_{k-1}, \qquad \Phi_{sb}^{(k)}\left(\sqrt{S_a}, \dfrac{m^{(k)}}{n^{(k)}}\right) = 0 \\ \alpha_k = \dfrac{2n^{(k)}}{S_b - S_{k-1}} \\ \beta_k = 0 \end{cases} \tag{5.12}$$

L'amélioration apportée par la forme affine est double :

– Dans la situation b) il n'y a aucune difficulté numérique et le coût calcul est faible du fait de la forme analytique.

– Dans les situations a) et c), et en utilisant la même méthode numérique, i.e. la méthode de Ridders, l'étape d'inversion est plus rapide que pour la reconstruction exponentielle car la convergence est significativement meilleure avec la forme polynomiale. Elle est également moins coûteuse à calculer.

La fonction affine par morceaux est une alternative intéressante car elle offre un gain en temps de calcul significatif lors de l'étape d'inversion. Une analyse mathématique de la forme affine ainsi qu'une étude plus détaillée à l'aide de comparaison avec la stratégie de reconstruction exponentielle sont fournies dans [Laurent et al., 2015].
Recherchant un ratio précision/coût optimal, toute amélioration apportée au niveau de ce type de procédure numérique apparaît comme un développement clé. De plus, le formalisme lié à une représentation affine permet d'éviter des problèmes informatiques propres au calcul d'une fonction exponentielle.

#### 5.1.2.3 Comparaison des reconstructions affines et exponentielles sur différentes distributions en taille

On propose maintenant de comparer numériquement la précision des deux approches via l'évolution de différentes distributions initiales définies sur l'intervalle $[0, 1]$ comme illustré par la figure(5.4) :

– Une fonction régulière : $f_0(S) = (1 + 8\,S)\,(1 - S)^2 \exp\left(0.001\left(1 - \dfrac{1}{(1-S)^2}\right)\right)$
– Une fonction de probabilité bêta : $f_0(S) = 105\left[S^4(1-S)^2\right]$
– Une fonction bimodale composée de deux fonctions bêta : $f_0(S) = 10\,\left[2S(1-S)^4 + S^4(1-S)\right]$
– Une fonction de probabilité gamma : $f_0(S) = \dfrac{15^5}{0.9991\,\Gamma(5)} S^4 \exp(-15\,S)$
– Une fonction lognormale : $f_0(S) = \dfrac{1.0023}{S\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\dfrac{(\log(S)-\mu)^2}{2\sigma^2}\right), \quad \sigma = 0.45, \quad \mu = -1.2777$

On détermine les moments d'ordre 0 et 3/2 des distributions $f_0$ sur chaque intervalle défini à partir d'une discrétisation uniforme de $N$ sections sur $[0, 1]$. La largeur d'une section est $\Delta S = 1/N$. A partir de ces moments, les reconstructions affine et exponentielle sont calculées et comparées par rapport à la distribution exacte $f_0$. On représente, en Fig.(5.5), la norme $L^2$ pour comparer les distributions $f_0$ et leurs reconstructions en fonction de la largeur de la section. La précision au second ordre de la reconstruction affine est vérifiée pour l'ensemble des distributions alors qu'une

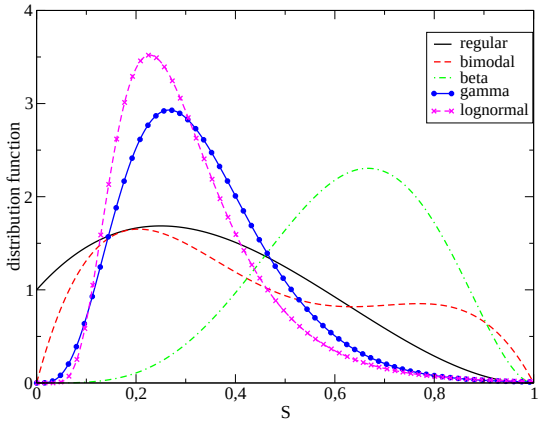


**FIGURE 5.4** – *Distributions initiales utilisées pour comparer numériquement l'approche affine et exponentielle*

réduction d'ordre pour les fonctions régulière, bêta et bimodale est observée pour la reconstruction exponentielle. Cela est dû au fait que le paramètre $b$ de l'exponentielle doit être limité numériquement sur certaines sections (entre 0.3% et 1% de l'ensemble des sections). D'une manière générale, le niveau de précision atteint avec l'approche affine est meilleur qu'avec l'approche exponentielle.

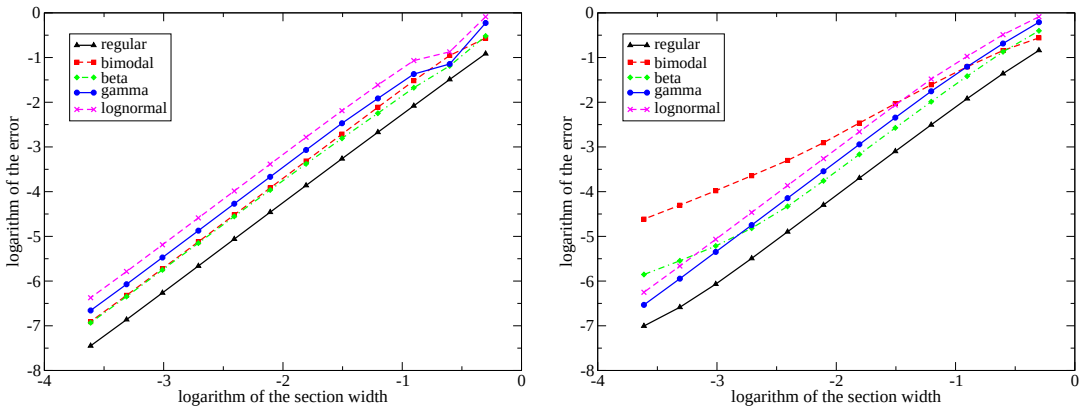


**FIGURE 5.5** – *Erreur illustrée par la norme $L^2$ pour les reconstructions affine (à gauche) et exponentielle (à droite)*

#### 5.1.2.4 Intégration des termes intra-sectionnels : Rapidité et intégration analytique de la reconstruction affine

La seconde amélioration concerne la manière dont sont calculés les termes sources. Dans ce paragraphe, on s'intéresse plus spécifiquement au cas des termes intra-sectionnels et aux stratégies numériques employées pour les méthodes TSM-MF affine et exponentielle.
A un instant et une position donnés, les hypothèses [HV2], [HT2] et [HS1], posées dans §4.2.2, garantissent que les intégrandes des termes sources d'échanges avec le gaz tels que $\mathbf{F^{(k)}}$ et $\mathrm{H}^{(k)}$ soient des fonctions qui dépendent uniquement de la variable taille $S$. Comme donnés en Eq.(4.29), la force de traînée et le terme d'échange de chaleur s'expriment sous la forme de polynômes de $S$. Quand la forme exponentielle est choisie, l'intégrale des termes intra-sectionnels peut être difficile à déterminer car elle se présente sous la forme générique suivante :

$$\mathrm{I_{p/q}} = a_k \int_{S_{k-1}}^{S_k} S^{p/q}\, e^{-b_k S}\, \mathrm{d}S \tag{5.13}$$

Quand $q = 1$ et 2, l'intégration analytique est possible mais fait intervenir des fonctions coûteuses comme $erf$ et $daw$ ; pour des valeurs supérieures de $q$ des stratégies numériques doivent être adoptées. La seconde situation est d'ailleurs souvent rencontrée comme en témoigne le détail des calculs des termes sources intra-sectionnels des méthodes TSM-MF fourni en Annexe A. Des méthodes

de quadrature semblent alors appropriées telles que celle de Gauss-Legendre qui utilise N noeuds fixes pour décrire la fonction à intégrer sur l'intervalle considéré :

$$\mathrm{I}_{\mathrm{p/q}} \approx \sum_{i=0}^{N} W_i^{GL} f\left(\frac{(S_k - S_{k-1})}{2}\left(Y_i^{GL}+1\right) + S_{k-1}\right) \tag{5.14}$$

où $Y_i^{GL}$ et $W_i^{GL}$ sont respectivement les abscisses et les poids des N points de la quadrature. Pour le cas de la dernière section qui ne possède pas de borne supérieure finie, une méthode de quadrature de type Gauss-Laguerre est utilisée. Le principal problème de cette approche à noeuds fixes est le cas des distributions raides pour lesquelles la NDF est concentrée près d'une borne de la section. Dans ce cas précis, une répartition fixe des noeuds n'est pas pertinente et la précision de la méthode diminue. Une stratégie alternative est alors envisageable [Doisneau et al., 2013]. Celle-ci repose sur une méthode de quadrature adaptative où les abscisses des noeuds est réévaluée de façon à suivre le profil de la répartition en nombre.
Quand la reconstruction affine est choisie, le calcul du terme source est uniquement réalisé sur l'intervalle $[S_a, S_b]$ sur lequel la fonction est positive comme définie dans l'Eq.(5.6). Les termes intra-sectionnels ont la forme générique suivante :

$$\mathrm{I}_{\mathrm{p/q}} = \int_{S_a}^{S_b} S^{p/q}\left[\frac{(\beta_k - \alpha_k)}{(S_b - S_a)}S + \frac{\alpha_k S_b - \beta_k S_a}{S_b - S_a}\right]\mathrm{d}S \tag{5.15}$$

Grâce à la forme polynomiale de l'intégrande, il est toujours possible de trouver une expression analytique. Elle est donnée par :

$$\mathrm{I}_{\mathrm{p/q}} = \frac{1}{P}\left(\frac{\alpha_k S_b - \beta_k S_a}{S_b - S_a}\right)(S_b^P - S_a^P) + \frac{1}{Q}\frac{(\beta_k - \alpha_k)}{(S_b - S_a)}(S_b^Q - S_a^Q) \tag{5.16}$$

où $P = 1 + \dfrac{p}{q}$ et $Q = 2 + \dfrac{p}{q}$.

**N.B.** La même analyse peut être faite pour l'évaluation des flux d'échanges de nombre et de masse entre les sections. Nous y revenons dans la dérivation d'un schéma numérique dédié à l'intégration des termes sources réactifs dans §8.1.2.

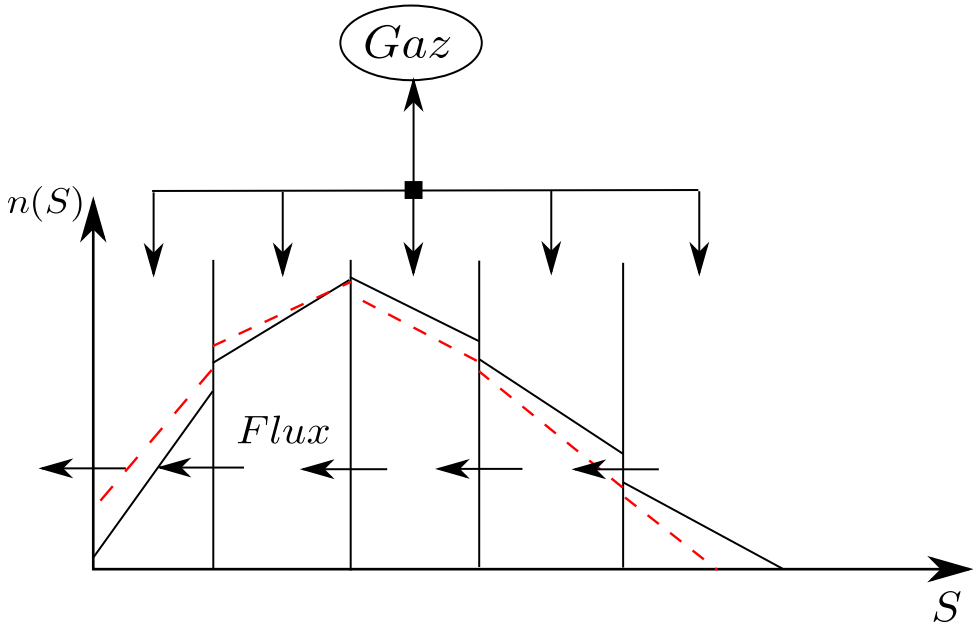


**FIGURE 5.6** – *Evolution dans l'espace des tailles de la NDF reconstruite avec la méthode TSM affine due à de l'évaporation (loi d'évaporation arbitraire) et illustration des flux entre sections et des échanges avec le gaz en couplage fort*

Le gain en temps de calcul pour l'approche TSM-MF affine est enfin illustré par des comparaisons sur des configurations complexes dans le chapitre 12.

### 5.1.3 Système diphasique complet

Le système diphasique complet couplant les équations de la phase dispersée suivant le formalisme TSM-MF et les équations de la phase gazeuse s'écrit :

$$
\left\{
\begin{array}{ll}
\partial_t \rho_g + \partial_{\mathbf{x}}.\left(\rho_g \mathbf{u_g}\right) = \sum_{k=1}^{\mathrm{N_{sec}}} \mathrm{M}^{(k)} & \\
\partial_t\left(\rho_g \mathrm{Y_i}\right) + \partial_{\mathbf{x}}.\left(\rho_g \mathrm{Y_i}\mathbf{u_g}\right) = 0, \qquad i = 1, ..., \mathrm{N_{spec}} - 1 \qquad \mathrm{Y_{N_{spec}}} = \mathrm{Y_{vap}} & \\
\partial_t\left(\rho_g \mathbf{u_g}\right) + \partial_{\mathbf{x}}.\left(\rho_g \mathbf{u_g} \otimes \mathbf{u_g} + p\right) = -\sum_{k=1}^{\mathrm{N_{sec}}} \left(\mathbf{F}^{(k)} - \mathrm{M}^{(k)}\mathbf{u}^{(k)}\right) & \\
\partial_t\left(\rho_g E_g\right) + \partial_{\mathbf{x}}.\left(\left(\rho_g E_g + p\right)\mathbf{u_g}\right) = -\sum_{k=1}^{\mathrm{N_{sec}}} \left(\left(\mathrm{H}^{(k)} + \mathbf{F}^{(k)}.\mathbf{u}^{(k)}\right)\right. & \\
\qquad\qquad \left. -\mathrm{M}^{(k)}\left(h^{(k)} + L_v^{(k)} + \frac{1}{2}\|\mathbf{u}^{(k)}\|^2\right)\right) & \\
\left.
\begin{array}{ll}
\partial_t n^{(k)} + \partial_{\mathbf{x}}.(n^{(k)}\mathbf{u}^{(k)}) & = \mathcal{N}^{(k+1)} - \mathcal{N}^{(k)} \\
\partial_t m^{(k)} + \partial_{\mathbf{x}}.(m^{(k)}\mathbf{u}^{(k)}) & = \left(\mathcal{E}^{(k+1)} - \mathcal{E}^{(k)}\right) - \mathrm{M}^{(k)} \\
\partial_t(m^{(k)}\mathbf{u}^{(k)}) + \partial_{\mathbf{x}}.(m^{(k)}\mathbf{u}^{(k)} \otimes \mathbf{u}^{(k)}) & = \left(\mathcal{E}^{(k+1)}\mathbf{u}^{(k+1)} - \mathcal{E}^{k}\mathbf{u}^{(k)}\right) \\
& \quad -\mathrm{M}^{(k)}\mathbf{u}^{(k)} + \mathbf{F}^{(k)} \\
\partial_t(m^{(k)}h^{(k)}) + \partial_{\mathbf{x}}.(m^{(k)}h^{(k)}\mathbf{u}^{(k)}) & = \left(\mathcal{E}^{(k+1)}h^{(k+1)} - \mathcal{E}^{(k)}h^{(k)}\right) \\
& \quad -\mathrm{M}^{(k)}h^{(k)} + \mathrm{H}^{(k)}
\end{array}
\right\} k = 1, ..., \mathrm{N_{sec}}
\end{array}
\right. \tag{5.17}
$$

Les $\mathrm{N_{sec}}$ systèmes fluides sont couplés à $\mathrm{N_{spec}} + 2$ équations d'Euler au travers de termes sources intra-sectionnels qui satisfont la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et d'énergie du mélange diphasique. La forme de tous les termes sources est donnée dans l'Eq.(4.29). Le détail des calculs des termes intra-sectionnels dans le contexte des méthodes TSM-MF est fourni en Annexe A.
Le terme $Y_{vap}$ représente la fraction massique de la vapeur issue de l'évaporation des gouttes. Le système gaz correspond à des équations de transport sur la masse volumique locale $\rho_g$, la vitesse $\mathbf{u_g}$ et l'énergie totale $E_g = E_{ref} + \int_{T_{ref}}^{T} c_{v,g}\mathrm{d}T + \frac{1}{2}\mathbf{u_g}^2$ avec $c_{v,g}$ qui est la capacité calorifique à volume constant et $E_{ref}$ qui est l'énergie de référence calculée à partir d'une température de référence $T_{ref}$. Nous rappelons que le cadre de notre étude est celui des sprays dilués pour lesquels le volume occupé par la phase dispersée demeure très faible par rapport au volume total et peut donc être négligé dans la phase gazeuse. Par soucis de clarté, nous avons choisi le système Euler mais l'utilisation des équations de Navier-Stokes (cf. §3.3.2) est possible comme montré dans la partie IV avec le code CEDRE.
A chaque instant et pour une position donnée, le nombre d'intégrations à réaliser pour le calcul des termes sources du système complet se répartit de la manière suivante :

– Termes intra-sectionnels $\mathrm{M}^{(k)}$, $\mathbf{F}^{(k)}$ et $\mathrm{H}^{(k)}$ soit $3 \times \mathrm{N_{sec}}$.

– Flux entre sections $\mathcal{N}^{(k)}$ et $\mathcal{E}^{(k)}$ soit $2 \times \mathrm{N_{sec}}$.

Dans le cas de la méthode Multi-Classe, seuls les termes d'échanges avec le gaz sont à déterminer et ils ne nécessitent pas d'intégration sur la variable taille. Cette approche présente donc un avantage d'un point de vue du temps de calcul. Pour les méthodes TSM-MF, le choix d'une reconstruction appropriée telle que la fonction affine est pertinente car elle réduit significativement la part du coût calcul introduite par 1- Un nombre plus important de termes sources. 2- Une étape d'intégration sur la variable taille et 3- Une reconstruction en taille et donc une étape d'inversion.

## 5.2 Etude des méthodes MF pour l'acoustique polydisperse diphasique

Dans cette partie, nous introduisons, dans un premier temps, le contexte d'étude de l'acoustique diphasique linéaire appliquée aux sprays évaporants. En effet, cette approche offre un cadre de validation pour les solveurs diphasiques dans la mesure où elle permet d'étudier le couplage entre les phases dans un régime instationnaire. Puis, nous proposons de dériver une relation de dispersion qui caractérise le comportement d'une onde acoustique dans un milieu diphasique polydisperse. Cette relation est obtenue en utilisant le formalisme des méthodes MF. Nous discutons aussi de l'importance de la prise en compte de la polydispersion sur la réponse acoustique par rapport au cas monodisperse. Finalement, nous évaluons les méthodes MF et nous illustrons surtout l'intérêt d'utiliser plusieurs moments en taille pour capturer l'acoustique polydisperse avec un minimum de sections.

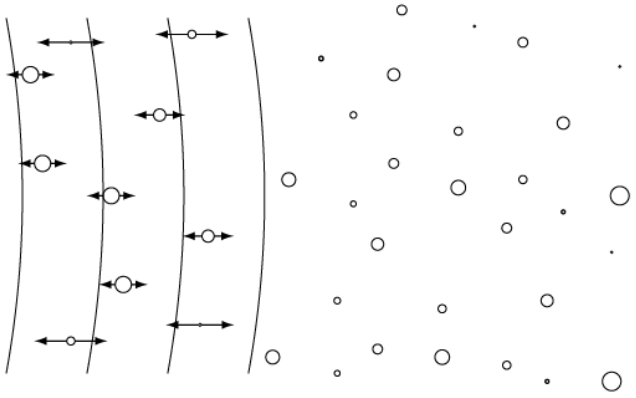

**Figure 5.7** – *Illustration du comportement des particules au passage d'une perturbation acoustique* ©*Doisneau*

### 5.2.1 Cadre théorique d'un cas d'acoustique diphasique avec évaporation

Nous considérons ici un milieu diphasique composé d'un brouillard de gouttes échangeant de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie avec sa propre vapeur. Les deux phases sont supposées initialement en équilibre thermique à la température d'ébullition des gouttes et au repos (vitesses nulles). Il n'y a, donc initialement, aucune interaction entre les phases. Nous cherchons la solution analytique régissant la propagation d'une onde progressive plane dans un tel milieu.
Nous étudions le cas d'une perturbation acoustique monochromatique de pulsation $\omega$ et de faible amplitude. La propagation de l'onde crée un déséquilibre de vitesse ainsi qu'un déséquilibre thermique entre les phases induisant un régime alternatif de condensation et d'évaporation autour de l'état d'équilibre saturé. Les échanges de masse et d'énergie sont décrits par le modèle d'évaporation contrôlé par la conductivité thermique présentée dans §3.4.2.1. La représentation harmonique de l'onde dans le milieu se fait par le suivi de toutes les variables du problème comme par exemple la vitesse du gaz :

$$u_g(t,x) = \sin(\omega t - k_1 x)\exp(-k_2 x)u_g^0 \tag{5.18}$$

où nous définissons le nombre d'onde complexe $\underline{k} = k_1 + ik_2$ et son équivalent pour un milieu monophasique $k_0 = \omega/c_0$. Nous cherchons une relation de dispersion de laquelle pourraient être déduits le terme d'atténuation spatiale $\alpha = 2k_2$ et le terme de dispersion $\beta = k_1^2 - (\omega/c_0)^2$ caractérisant le comportement de l'onde.

### 5.2.2 Relation de dispersion pour les milieux polydisperses : dérivation pour les méthodes MF

Une relation de dispersion a été dérivée pour un spray monodisperse dans [Dupays and Vuillot, 2002] à partir d'équations de conservation de la phase liquide basées sur le formalisme de la méthode MC décrite dans §4.1.3. Nous étendons cette étude à une phase dispersée polydisperse en

employant l'approche MF continue en taille. La dérivation s'effectue à partir du système semi-cinétique présenté dans Eq.(4.19) mais écrit en 1D. En choisissant les hypothèses MF [HV1,2], [HT1,2] puis [HS1], nous dérivons dans l'Annexe B.1 une expression du nombre d'onde complexe fonction des propriétés du gaz et des gouttes. La relation de dispersion polydisperse s'écrit :

$$\left(\frac{\underline{k}c_0}{\omega}\right)^2 = \frac{\left[1-\gamma\frac{c_{p,l}(1-\lambda(\phi+(\gamma-1)/\gamma))}{c_{p,g}}\sum_{k=1}^{\mathrm{N_{sec}}}\frac{\mu_k}{i\omega\tau_T^{(k)}}\right]}{\left[1-\frac{c_{p,l}(1-\phi\lambda)}{c_{p,g}}\sum_{k=1}^{\mathrm{N_{sec}}}\frac{\mu_k}{i\omega\tau_T^{(k)}}\right]}\left[1+\sum_{k=1}^{\mathrm{N_{sec}}}\frac{\mu_k}{(1-i\omega\tau_u^{(k)})}\right] \tag{5.19}$$

où nous avons défini :

$$\lambda = \frac{c_{p,g}T_0}{L_v}, \qquad \phi = -\frac{\rho_{g,0}(\gamma-1)}{\gamma\rho_l} \tag{5.20}$$

Nous introduisons aussi le rapport massique de chaque section $k$, $\mu_k = m^{(k)}/\rho_{g,0}$ qui compare la concentration massique en gouttes de la section à la masse volumique du gaz pour l'état stationnaire ; cela représente donc le taux de chargement de la section. Nous définissons également le terme $\mu_{tot} = \sum \mu_k$ pour représenter le taux de chargement total du spray.
Les différences entre les méthodes OSM-MF et TSM-MF ne s'expriment qu'au travers du calcul des temps de relaxation des gouttes en fonction de la reconstruction choisie pour la distribution en taille dans les sections. En régime de Stokes, nous avons en effet :

$$\tau_u^{(k)} = \frac{\rho_l\,\tilde{S}_k}{18\,\pi\,\mu_g} \qquad \tau_T^{(k)} = \frac{3c_{p,l}}{2c_{p,g}}\,\mathrm{Pr}\,\tau_u(\tilde{S}_k), \qquad \left(S_{31}^{(k)}\right)^2 = \frac{\int_{S_{k-1}}^{S_k} S^{3/2}\,\kappa_0^{(k)}(S)\,\mathrm{d}S}{\int_{S_{k-1}}^{S_k} S^{1/2}\,\kappa_0^{(k)}(S)\,\mathrm{d}S} \tag{5.21}$$

où le terme $\kappa_0^{(k)}$ représente la fonction de forme dans les sections pour la solution stationnaire. Pour la méthode OSM-MF, la reconstruction est constante dans la section ; les temps caractéristiques ne dépendent donc que des bornes de la section. La méthode TSM-MF permet une amélioration majeure de ce calcul car elle assure la prise en compte de la répartition en masse au sein des sections, avantage certain quand les sections sont larges. Une étude qualitative plus poussée est proposée dans §5.2.4 avec un ensemble de comparaisons entre méthodes et techniques de discrétisation de l'espace des tailles.
Une relation de dispersion continue en taille peut être dérivée directement à partir de l'étape semi-cinétique donné dans Eq.(B.3). La relation polydisperse écrite pour les modèles converge pour un grand nombre de sections vers cette relation continue :

$$\begin{aligned}\left(\frac{\underline{k}c_0}{\omega}\right)^2 = \frac{\left[1-\frac{\gamma\rho_l c_{p,l}(1-\lambda(\phi+(\gamma-1)/\gamma))}{6\,\rho_{g,0}\sqrt{\pi}\,c_{p,g}}\int_{\mathbb{R}^+}\frac{S^{3/2}\,n(S)}{i\omega\tau_T(S)}\mathrm{d}S\right]}{\left[1-\frac{\rho_l\,c_{p,l}(1-\phi\lambda)}{6\,\rho_{g,0}\sqrt{\pi}\,c_{p,g}}\int_{\mathbb{R}^+}\frac{S^{3/2}\,n(S)}{i\omega\tau_T(S)}\mathrm{d}S\right]}\ldots \\ \ldots\left[1+\frac{\rho_l}{6\,\rho_{g,0}\sqrt{\pi}}\int_{\mathbb{R}^+}\frac{S^{3/2}\,n(S)}{(1-i\omega\tau_u(S))}\mathrm{d}S\right]\end{aligned} \tag{5.22}$$

Dans le reste de l'étude, nous définissons les nombres adimensionnés pour l'atténuation $\alpha^*$ et la dispersion $\beta^*$ : $\alpha^* = \frac{c_0}{\omega}\alpha$ et $\beta^* = \frac{c_0}{\omega}\beta$. Il est à noter que $\alpha^* > 0$ représente un amortissement de l'onde. A contrario, des valeurs négatives signifient que l'onde est amplifiée. Le terme de dispersion $\beta^*$ caractérise la vitesse du son qui décroît au fur et à mesure que la valeur $\beta^*$ est élevée (étant positive). Dans le contexte spécifique de l'évaporation de gouttes dans leur propre vapeur et pour un spray monodisperse, il a été observé qu'une amplification de l'onde était possible.

### 5.2.3 Importance de la polydispersion sur la réponse acoustique

Dans cette partie, nous souhaitons étudier l'impact de la polydispersion en incluant toute influence de choix de méthodes pour la description du spray. Pour cela, nous déterminons le comportement exact de l'onde acoustique à partir de la relation de dispersion continue donnée par Eq.(5.22). Deux distributions en taille sont proposées : une fonction lognormale et sa distribution équivalente

monodisperse c'est-à-dire ayant le même rayon moyen $r_{31}$ qui est la taille appropriée pour des interactions diphasiques en régime de Stokes comme expliqué dans [Doisneau et al., 2014]. Nous choisissons une fonction lognormale exprimée en fonction de la variable rayon ; nous la notons $L_r$. Cette dernière et son rayon $r_{31}$ sont donnés par :

$$L_r(r) = \frac{1}{r\ln(\sigma_{ln})\sqrt{2\pi}} \exp\left(-0.5\left(\frac{(\ln r - \ln(\mu_{ln}))}{\ln(\sigma_{ln})}\right)^2\right),\ r_{31} = \left(\frac{\int_0^{+\infty} r^3\, L_r(r)\,\mathrm{d}r}{\int_0^{+\infty} r\, L_r(r)\,\mathrm{d}r}\right)^{1/2} \tag{5.23}$$

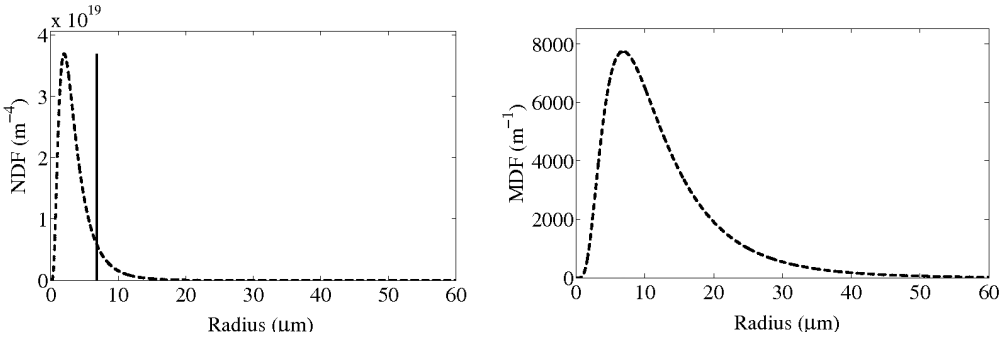


**FIGURE 5.8** – *NDF pour les distributions lognormale et monodisperse de rayon $r_{31}$ équivalent (à gauche) / (à droite) MDF correspondants aux NDF (MDF=$4/3\pi r^3$NDF) : Distribution lognormale : - - - ; Distribution Dirac (amplitude arbitraire) : ——*

Nous choisissons les paramètres suivants pour la fonction lognormale : $\sigma_{ln} = 1.9$, $\mu_{ln} = 3.10^{-6}$. La distribution est étudiée sur l'intervalle fini $r = [0\,\mu m; 100\,\mu m]$. Cette dernière ainsi que la répartition en masse sont illustrées dans la Fig.(5.8). Les propriétés du gaz et du spray sont données dans Tab.(5.1). Comme étude supplémentaire, nous proposons des résultats sur la réponse acoustique pour deux chaleurs latentes de vaporisation $L_{v,1}$ et $L_{v,2}$. En effet, il a été mis en évidence dans [Dupays and Vuillot, 2002] que le phénomène d'atténuation ou d'amplification de l'onde était fortement liée à la thermodynamique de la vapeur et plus particulièrement de ce paramètre. En Fig.(5.9), nous confirmons qu'une faible valeur de la chaleur latente peut induire une amplification de la pertubation acoustique, représentée par des valeurs négatives du coefficient $\alpha^*$ pour la configuration $L_{v,1}$. Nous démontrons dans le cas polydisperse que le transfert de masse défini dans le cadre du modèle de conductivité thermique décrit dans §3.4.2.1 agit comme un mécanisme moteur des instabilités acoustiques.
Concernant uniquement l'influence de la polydispersion, les différences entre les distributions lognormale et monodisperse sont importantes. Pour le cas $L_{v,1}$, les courbes sur la dispersion et l'atténuation de la lognormale présentent des extrema inférieurs de près de 40% par rapport à la configuration monodisperse. De plus, les extrema sont positionnés à des valeurs différentes de fréquences ; cela est notable pour le cas $L_{v,2}$ pour lequel la position du maximum d'atténuation de la configuration lognormale est inférieure d'une décade par rapport au cas monodisperse.

**TABLE 5.1** – *Propriétés du gaz et du liquide*

| Property | Value | Property | Value |
|---|---|---|---|
| $T_0$ | 3498.8 K | $\mu_{tot}$ | 0.396 |
| $\rho_0$ | 3.78 kg/m$^3$ | $\rho_l$ | 1766 kg/m$^3$ |
| $c_{p,g}$ | 2021.8 J/kg/K | $c_{p,l}$ | 1375 J/kg/K |
| $\mu_g$ | $8.855\,10^{-5}$ kg/m/s | $Pr$ | 0.8 |
| $\gamma$ | 1.23 | | |
| $L_{v,1}$ | $5.0\,10^6$ J/kg | $L_{v,2}$ | $10.0\,10^6$ J/kg |

### 5.2.4 Etude des stratégies de discrétisation en taille et des reconstructions sectionnelles pour l'acoustique diphasique

Nous nous intéressons à la capacité des méthodes MF à restituer la réponse acoustique d'un milieu diphasique composé d'un spray polydisperse. Plusieurs paramètres impactent la qualité de la représentation d'une distribution donnée. Nous présentons ici deux critères majeurs :

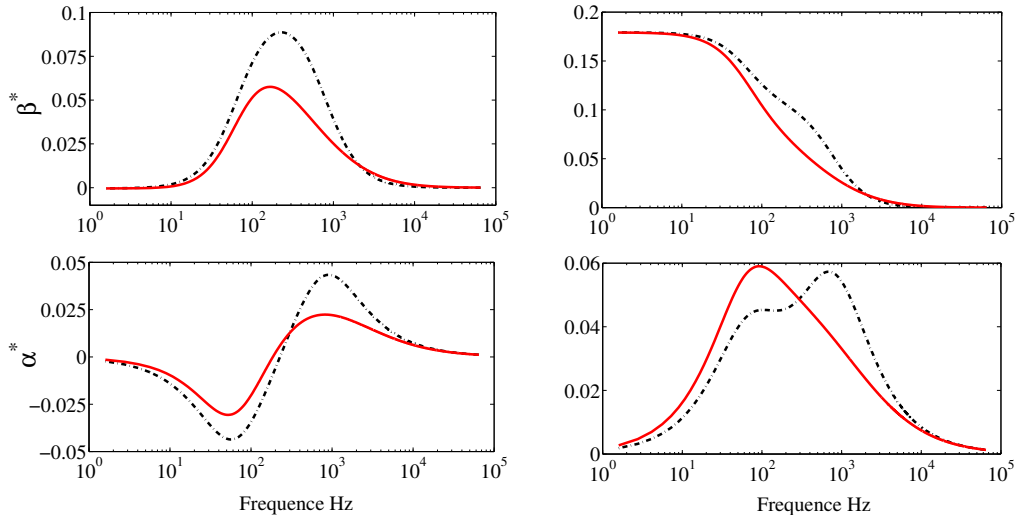


**FIGURE 5.9** – *Dispersion $\beta^*$ (en haut) et atténuation $\alpha^*$ (en bas) d'une onde acoustique dans un milieu diphasique : Ligne continue : Distribution lognormale et ligne discontinue : Distribution monodisperse avec $r_{31}$ équivalent. Résultats pour deux chaleurs latentes : à gauche : $L_{v,1}$, à droite : $L_{v,2}$*

1. La discrétisation de l'espace des tailles.

2. Le choix de la fonction de forme présumée dans les sections.

L'espace des tailles peut par exemple être découpé en intervalles de rayon ou surface de largeur constante. Il existe aussi d'autres possibilités pour la discrétisation en s'assurant que toutes les sections contiennent la même concentration massique de gouttes. Différentes études ont été menées dans le cas de sprays polydisperses inertes dans [Doisneau et al., 2014] et étendues ici au cas évaporant. Dans l'optique d'atteindre un ratio coût/précision intéressant, il est demandé aux méthodes MF de décrire avec fidélité des phénomènes physiques avec un minimum de sections. Nous proposons alors une étude paramétrique qui souligne les paramètres influents dans le contexte de l'acoustique diphasique polydisperse.

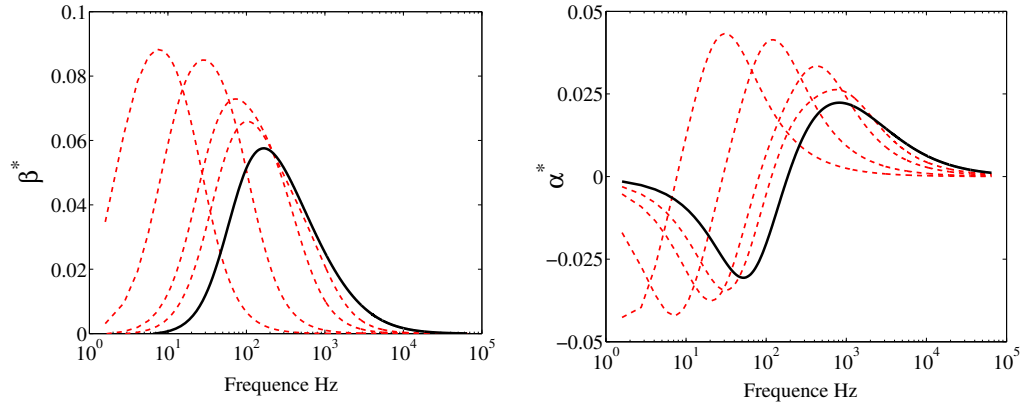


**FIGURE 5.10** – *Dispersion $\beta^*$ et atténuation $\alpha^*$ d'une onde acoustique dans un milieu diphasique évaporant avec une distribution lognormale pour le spray ; les propriétés du milieu sont données dans Tab.(5.1) avec $L_v = 5.10^{-6}$ J/kg.*
*Résultats pour la réponse acoustique polydisperse exacte : Ligne continue — et l'approche MF avec 2, 4, 8 et 12 sections et la discrétisation en taille $\Delta r = cst$ et la distribution approchée $\kappa(r) = cst$ : Ligne discontinue - - - -*

Dans un premier temps, nous comparons deux stratégies de discrétisation de l'espace des tailles :

– La discrétisation à $\Delta r$ constant.

– La discrétisation à $\Delta m$ constant qui fixe les bornes des méthodes MF $S_k = 4\pi r_k^2$ de manière à

avoir une répartition en masse pour la distribution initiale égale dans toutes les sections :

$$m^{(k)} = \int_{r_{k-1}}^{r_k} r^3\, n_0(r)\, \mathrm{d}r = \frac{M_{tot}}{\mathrm{N_{sec}}} \tag{5.24}$$

Puis, nous étudions l'influence de la fonction de forme $\kappa$ pour décrire la distribution initiale au sein de chaque section. Le profil de cette fonction détermine la façon dont sont calculés les tailles moyennes et les temps de relaxation des particules $\tau_u^{(k)}$ et $\tau_T^{(k)}$ comme donnés par les Eq.(B.1) & (B.6) :

– La fonction de distribution constante $\kappa(r)$ : Comme cela a été proposé dans la méthode MF à un moment en taille, la distribution initiale est décrite par une fonction constante au sein des sections. Dans §4.2.2.1, nous avons choisi une répartition constante en surface. Elle est ici constante en rayon ce qui correspond à une distribution en surface en $1/\sqrt{S}$ puisque $\kappa(r) = 4\sqrt{\pi\, S}\,\kappa(S)$. Les temps de relaxation pour les sections sont obtenus à partir d'un rayon moyen $r_{31}^{(k)}$ qui dépend uniquement des bornes de la section :

$$r_{31}^{(k)} = 0.5\left(r_k^2 + r_{k-1}^2\right)^{1/2} \tag{5.25}$$

– Nous prenons exactement en compte la fonction de distribution initiale $n_0(r)$. Il s'agit ici de calculer les rayons moyens $r_{31}^{(k)}$ exacts des sections :

$$\left(r_{31}^{(k)}\right)^2 = \frac{\displaystyle\int_{r_{k-1}}^{r_k} r^3\, n_0(r)\, \mathrm{d}r}{\displaystyle\int_{r_{k-1}}^{r_k} r\, n_0(r)\, \mathrm{d}r} \tag{5.26}$$

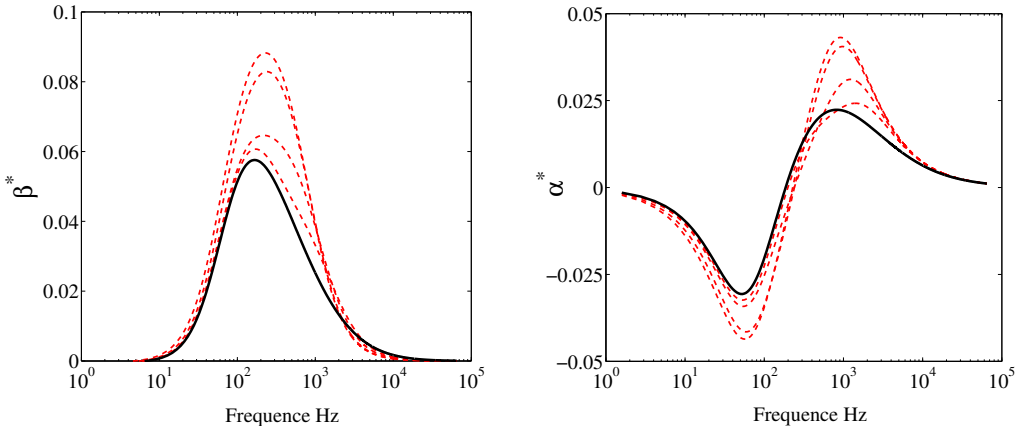


**FIGURE 5.11** – *Dispersion $\beta^*$ et atténuation $\alpha^*$ d'une onde acoustique dans un milieu diphasique évaporant avec une distribution lognormale pour le spray ; les propriétés du milieu sont données dans Tab.(5.1) avec $L_v = 5.10^{-6}$ J/kg.*
*Résultats pour la réponse acoustique polydisperse exacte : Ligne continue — et l'approche MF avec 2, 4, 8 et 12 sections et la discrétisation en taille $\Delta r = cst$ et la distribution exacte $n_0(r)$ : Ligne discontinue - - - -*

La discrétisation de l'espace des tailles est réalisée sur un intervalle $r = [0\,\mu m; 100\,\mu m]$ ce qui est suffisamment large pour étudier la distribution lognormale donnée dans §5.2.3. La quantité de masse contenue sur l'intervalle $r = [100\,\mu m; +\infty[$ est ajoutée à la dernière section ; elle représente moins de 1% de la concentration totale.
Afin de mettre en évidence l'influence des différents paramètres numériques, nous présentons quatre résultats couvrant ainsi toutes les combinaisons possibles entre les deux stratégies de discrétisation et les deux approches pour la distribution initiale et le calcul des temps de relaxation par section. Pour chaque situation, nous proposons une étude de convergence en sections pour la méthode MF en utilisant 2, 4, 8 et 12 sections. Les réponses acoustiques obtenues sont comparées à celle de la réponse polydisperse exacte fournie par l'Eq.(5.22) et illustrée en Fig.(5.9).
Dans un premier temps, nous comparons les résultats de la discrétisation de l'espace des tailles $\Delta r = cst$ à ceux obtenus en employant une stratégie avec $\Delta m = cst$. Dans les deux cas, nous utilisons

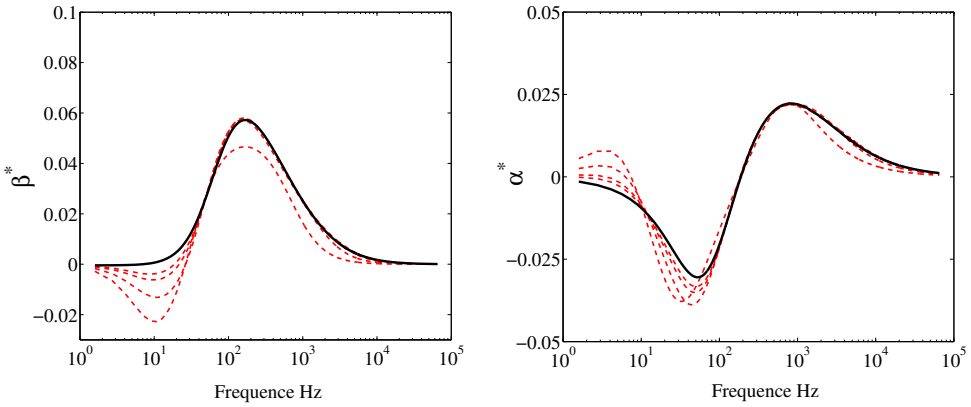


**FIGURE 5.12** – *Dispersion $\beta^*$ et atténuation $\alpha^*$ d'une onde acoustique dans un milieu diphasique évaporant avec une distribution lognormale pour le spray ; les propriétés du milieu sont données dans Tab.(5.1) avec $L_v = 5.10^{-6}$ J/kg.*
*Résultats pour la réponse acoustique polydisperse exacte : Ligne continue — et l'approche MF avec 2, 4, 8 et 12 sections et la discrétisation en taille $\Delta m = cst$ et la distribution approchée $\kappa(r) = cst$ : Ligne discontinue - - - -*

la distribution approchée $\kappa(r) = cst$. Les résultats sont respectivement donnés par les Fig.(5.10) & (5.12). La stratégie $\Delta r = cst$ offre une convergence peu intéressante car l'erreur sur la position et l'amplitude des extrema des courbes d'atténuation et de dispersion est importante : même avec 12 sections les résultats ne sont pas satisfaisants. L'approche $\Delta m = cst$ est plus pertinente car les extrema sont correctement positionnés aux bonnes fréquences ; c'est leur amplitude qui est encore mal estimée avec un nombre trop faible de sections. Les résultats sont acceptables à partir de 8 sections. Le discrétisation à $\Delta m$ constant semble être la plus appropriée pour étudier des distributions avec une répartition de la masse particulièrement importante dans l'espace des tailles comme illustré par la Fig.(5.8). En effet, la concentration massique impacte fortement l'influence de certaines gammes de taille sur la réponse acoustique globale. Dans l'Eq.(B.10), les rapports massiques $\mu_k$ sont des coefficients pondérateurs de la contribution de chaque section dans la relation de dispersion polydisperse. L'approche $\Delta m = cst$ définit donc des gammes de tailles de gouttes qui jouent un rôle équivalent dans le bilan acoustique.
Dans un second temps, nous évaluons l'importance de la description de la distribution initiale au sein des sections pour une même stratégie de discrétisation de l'espace des tailles. Ici, nous prenons $\Delta r = cst$. Les résultats obtenus avec l'approche $\kappa(r) = cst$ et la distribution exacte sont respectivement donnés par les Fig.(5.10) & (5.11). La distribution exacte offre de très bons résultats en évaluant les positions des extrema de manière bien plus précise. En effet, la répartition de la masse au sein des sections est exactement décrite et les temps de relaxation sont représentatifs de la gamme de tailles couverte par la section. Seul l'effet de la discrétisation de l'espace des tailles explique les erreurs sur l'amplitude des courbes d'atténuation et de dispersion. Cette comparaison montre ainsi qu'une réprésentation précise de la distribution au sein des sections améliore significativement l'effet de la polydispersion de la répartition globale.
Finalement, nous étudions à nouveau les approches avec une distribution exacte par section et la fonction approchée $\kappa(r) = cst$ en utilisant la discrétisation en taille avec $\Delta m$ constant. En comparant les résultats des Fig.(5.12) & (5.13), les deux offrent une convergence rapide du fait de la stratégie $\Delta m$ constant qui semble adaptée au cas de l'acoustique diphasique. Le choix d'une approche exacte de la distribution assure d'excellents résultats avec peu de sections. En effet, la réponse acoustique est parfaitement obtenue avec 4 sections alors qu'un minimum de 8 sections est nécessaire avec une fonction de distribution constante $\kappa(r)$.
Cette étude montre qu'une discrétisation avec une répartition sectionnelle constante en masse est à privilégier pour une situation d'acoustique diphasique. Afin de mettre en valeur le choix d'une reconstruction d'ordre élevée dans les sections, nous avons comparé les résultats obtenus avec des temps de relaxation calculés pour la méthode OSM-MF ($\kappa(r) = cst$ ) et des temps calculés à partir du $r_{31}^{(k)}$ de la distribution exacte. Les temps caractéristiques sont mieux évalués dans le second cas. Il est alors possible d'utiliser moins de sections tout en obtenant une réponse acoustique fidèle. Comme illustré par la Fig.(5.13), nous concluons que le choix combiné d'une discrétisation constante en masse et une représentation précise de la distribution dans les sections est très intéressant. Pour la configuration lognormale donnée dans notre étude, seulement 4 sections suffisent. Dans le cadre d'études plus générales, des calculs à partir des distributions exactes ne sont pas possibles. L'intérêt

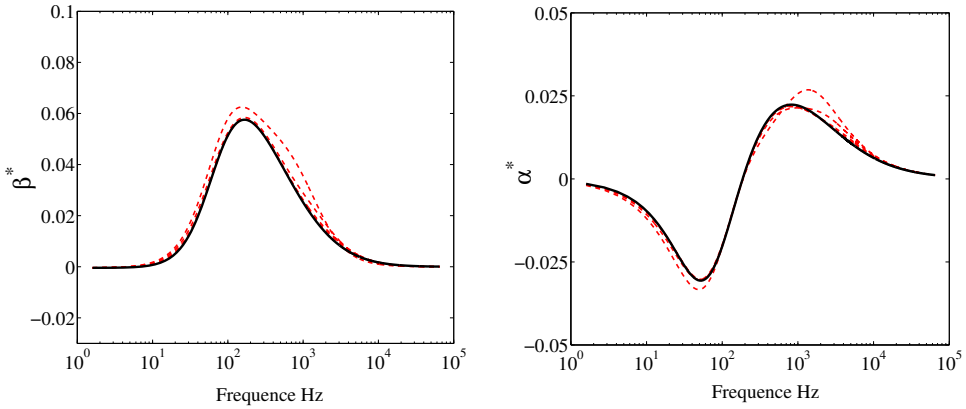


**FIGURE 5.13** – *Dispersion $\beta^*$ et atténuation $\alpha^*$ d'une onde acoustique dans un milieu diphasique évaporant avec une distribution lognormale pour le spray ; les propriétés du milieu sont données dans Tab.(5.1) avec $L_v = 5.10^{-6}$ J/kg.*
*Résultats pour la réponse acoustique polydisperse exacte : Ligne continue — et l'approche MF avec 2, 4, 8 et 12 sections et la discrétisation en taille $\Delta m = cst$ et la distribution exacte $n_0(r)$ : Ligne discontinue - - -*

de la méthode TSM-MF est justifié car elle prend en compte les effets de la polydispersion avec un nombre inférieur de sections par rapport à la méthode OSM-MF. Dans la suite de nos études, nous utilisons exclusivement l'approche à deux moments en taille.

## Conclusion du chapitre 5

Dans ce chapitre, nous avons amélioré les méthodes TSM-MF en proposant une fonction de reconstruction affine par morceaux conciliant respect des conditions de réalisabilité sur les moments et attractivité. En effet, la forte non-linéarité de la fonction de forme exponentielle est pénalisante en terme de temps de calcul ; l'approche affine réduit significativement le coût de l'étape d'inversion. De plus, la forme polynomiale offre une grande flexibilité et autorise un calcul analytique des termes sources sectionnels. La nouvelle reconstruction affine est un développement majeur car elle est la pierre angulaire des méthodes TSM-MF en décrivant la polydispersion au sein des sections. En outre, le transport des moments dans l'espace physique ainsi que dans l'espace des tailles sont autant d'appels à l'étape d'inversion qui soulignent l'apport de l'approche affine. Des comparaisons entre les deux familles de reconstruction sont proposées dans le chapitre 12 pour des simulations 2D diphasiques réactives.
La seconde étude composant ce chapitre a fixé le cadre théorique de l'acoustique linéaire diphasique dans le cadre des sprays polydisperses évaporants. Aussi, une relation de dispersion a été dérivée en utilisant le formalisme des méthodes MF. Une relation continue en taille a également été écrite afin de décrire de manière exacte la distribution en taille. Les comparaisons entre une réponse acoustique d'un spray polydisperse et celle d'une distribution monodisperse jugée équivalente montrent qu'il est important de restituer dans toute sa richesse la forme des distributions de taille d'autant plus que celles-ci peuvent être relativement variées et étendues en propulsion solide. Cette étude paramétrique illustre l'intérêt d'une description précise de la distribution en taille au sein des sections. Les méthodes TSM-MF offrent donc un compromis intéressant entre la restitution de la physique d'un spray polydisperse et la réduction du nombre de sections.
Le chapitre suivant présente le second axe d'améliorations de cette thèse pour la description des brouillards de gouttes à savoir des méthodes eulériennes Multi-Fluide étendues aux cas des gouttes bicomposants d'$Al/Al_2O_3$.

# Chapitre 6

# Extension des méthodes eulériennes pour la description des gouttes bicomposants

*Dans ce chapitre, nous proposons d'étendre les méthodes eulériennes à la description des gouttes bicomposants. Dans un premier temps, nous exposons les limitations des méthodes eulériennes conditionnées par la variable taille. Aussi, nous introduisons une nouvelle approche cinétique basée sur le suivi de la masse de deux composants non miscibles. Dans une seconde partie, nous proposons la dérivation d'un modèle Multi-Fluide bicomposant construit autour d'une discrétisation d'un espace des masses à deux dimensions et de l'emploi de moments d'ordre 0 et 1. La troisième partie est une proposition d'une méthode Multi-Classe pour les sprays bicomposants. Dans la dernière partie, nous développons une méthode MF bicomposant simplifiée, adaptée plus spécifiquement à la combustion des gouttes en propulsion solide via un conditionnement de la masse d'aluminium par la masse d'alumine. Ainsi, le suivi de la bicomposition de la goutte est réduit à l'étude de l'espace de la masse d'alumine conduisant à un gain en temps de calcul grâce à une simplification du calcul des termes sources.*

## 6.1 Conditionnement par la composition massique de la goutte

Dans cette partie, nous présentons, tout d'abord, les limites de l'approche sectionnelle décrite dans les chapitres 4 et 5 pour la description et le suivi de la polydispersion en taille de gouttes bicomposants. Enfin, nous proposons une nouvelle approche basée sur la prise en compte des masses d'aluminium et d'alumine à la place de la variable taille. Nous détaillons ainsi une équation cinétique décrivant l'évolution de la NDF pour une phase dispersée bicomposant.

### 6.1.1 Limitations du conditionnement par la taille pour la combustion des gouttes bicomposants

Dans le contexte spécifique de la combustion des gouttes d'aluminium, la présence d'un lobe d'alumine inerte sur les gouttes constitue une différence majeure par rapport à la combustion de gouttes d'hydrocarbures. Notons que si le grossissement du lobe est négligé ou non pris en compte, ce qui est le cas pour les modèles de combustion présentés dans §2.4, la masse d'alumine reste constante en cours de combustion et l'approche en taille reste alors pertinente. En effet, l'évolution de la taille des gouttes peut directement être reliée à l'évolution de la masse d'aluminium. A ce jour, les paramètres des modèles de combustion (temps de combustion, évolution de la calotte d'alumine...) sont pour la plupart associés à une taille de goutte initiale et à une taille de résidu. En première approximation, la granulométrie initiale est alors décrite par une distribution discrète constituée d'autant de masses de Dirac que de tailles initiales pour les gouttes d'aluminium. Chaque masse de Dirac est transportée de manière indépendante dans l'espace des tailles et évolue de manière lagrangienne jusqu'à atteindre la taille du résidu. Avec l'approche MC, il est donc naturel d'attribuer à une classe/sample de gouttes des paramètres constants durant toute son évolution dans l'espace des tailles.
L'amélioration des modèles d'écoulement pour décrire et suivre la polydispersion en taille des sprays autorise le développement de modèles de combustion à l'échelle de la goutte plus représentatifs.

Ainsi, le suivi du grossissement potentiel du lobe d'alumine suite à une rétrodiffusion d'oxydes d'aluminium constitue une limite de modélisation pour les méthodes eulériennes présentées dans §4.1.2. Le suivi de la taille des gouttes n'est pas suffisant pour décrire l'évolution de la composition en masse des deux composants de la goutte. Il est donc nécessaire d'introduire une dimension supplémentaire à l'espace des phases afin de prendre en compte convenablement les transferts de masse de chacun des composants.
On différencie les développements proposés dans cette thèse des modèles de sprays multicomposants [Bruyat, 2012] adaptés aux gouttes d'hydrocarbures. Les composants sont miscibles et une approche thermophysique continue est applicable. L'étude concerne ici deux composants non miscibles présentant des propriétés distinctes.
Nous proposons de représenter la NDF via les masses d'aluminium et d'alumine plutôt qu'avec la variable taille. La composition de la goutte ainsi que les transferts de masse s'expriment naturellement. D'un point de vue physique, ce choix est pertinent car la taille des résidus correspond exactement à la masse d'alumine restante en fin de combustion. La taille est donc une variable dérivée. Dans la partie suivante, nous présentons de nouvelles formulations de la NDF et de l'équation cinétique W-B selon un conditionnement basé sur la bicomposition en masse des gouttes.
La dérivation d'une méthode reprenant le formalisme de l'approche Multi-Classe est une alternative intéressante mais les difficultés rencontrées pour décrire les interactions entre gouttes telles que la coalescence restent les mêmes que pour le conditionnement en taille. Par la suite, une approche Multi-Classe bicomposant est proposée mais nous dérivons dans un premier temps une méthode Multi-Fluide basée sur une discrétisation continue de l'espace des masses.

### 6.1.2 Nouvelle approche cinétique basée sur la composition de la goutte

En conservant l'approche statistique adaptée à l'étude des écoulements dilués ou modérément denses, le spray polydisperse constitué de gouttes bicomposants peut être à nouveau approché par une fonction de densité en nombre $f$ où la quantité $f(t,\mathbf{x},\mathbf{u},T,m_{al},m_{ox})\mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{u}\mathrm{d}T\mathrm{d}m_{al}\mathrm{d}m_{ox}$ est le nombre moyen des gouttes, à l'instant $t$, au voisinage $\mathrm{d}\mathbf{x}$ de la position $\mathbf{x}$, au voisinage $\mathrm{d}\mathbf{u}\mathrm{d}T\mathrm{d}m_{al}\mathrm{d}m_{ox}$ de la vitesse $\mathbf{u}$, de la température $T$ et de la composition massique $(m_{al},m_{ox})$. Les indices $al$ et $ox$ désignent respectivement les espèces aluminium et alumine liquides. Les termes $m_{al}$ et $m_{ox}$ sont ainsi les masses d'aluminium et d'alumine au sein d'une goutte. Une équation de type Williams-Boltzmann permet de décrire l'évolution du spray. En négligeant tout phénomène d'interactions entre particules telles la coalescence et la fragmentation, cette équation de transport s'écrit :

$$\partial_t f + \mathbf{u}.\partial_{\mathbf{x}} f + \partial_{\mathbf{u}}.\left(\frac{\mathbf{F}_p}{m_p} f\right) + \partial_T\left(\frac{\mathrm{H}_p}{m_p c_{p,p}} f\right) - \partial_{m_{al}}(\dot{m}_{al} f) - \partial_{m_{ox}}(\dot{m}_{ox} f) = 0 \tag{6.1}$$

où $\mathbf{F}_p$ et $\mathrm{H}_p$ sont respectivement la force de traînée et le terme d'échange de chaleur. Les termes $\dot{m}_{al}$, $\dot{m}_{ox}$ représentent les taux de variation massique de chacun des composants de la goutte : $m_{al}$ et $m_{ox}$. Par convention, les termes $\dot{m}_{al/ox}$ sont positifs quand le flux de masse est transféré de la goutte vers la phase gazeuse. Le terme $c_{p,p}$ est la capacité calorifique massique moyenne de la goutte. Nous l'évaluons en première approximation comme la moyenne des capacités calorifiques moyennes $c_{p,al}$ et $c_{p,ox}$ pondérée par les fractions massiques des deux composants.
Les dépendances pour les termes $\mathbf{F}_p$, $\mathrm{H}_p$ et $\mathrm{K}_p$ s'écrivent :

$$\begin{cases} \mathbf{F}_p = \mathbf{F}_p\left(\mathbf{u},\mathbf{u_g},d\left(m_{al},m_{ox},T\right)\right) = \mathbf{F}_p\left(\mathbf{u},\mathbf{u_g},m_{al},m_{ox},T\right) \\ \mathrm{H}_p = \mathrm{H}_p\left(\mathbf{u},\mathbf{u_g},d\left(m_{al},m_{ox},T\right),T,T_g\right) = \mathrm{H}_p\left(\mathbf{u},\mathbf{u_g},m_{al},m_{ox},T,T_g\right) \\ \mathrm{K}_p = \mathrm{K}_p\left(\mathbf{u},\mathbf{u_g},d\left(m_{al},m_{ox},T\right),T,T_g\right) = \mathrm{K}_p\left(\mathbf{u},\mathbf{u_g},m_{al},m_{ox},T,T_g\right) \end{cases} \tag{6.2}$$

où $d(m_{al},m_{ox},T)$ est le diamètre de la goutte bicomposant supposée sphérique. La taille est fonction de la composition massique de la goutte et des masses volumiques qui dépendent, en toute rigueur, de la température de la goutte. Son diamètre se définit alors par :

$$d(m_{al},m_{ox},T) = \left(\frac{6}{\pi}\right)^{1/3}\left(\frac{m_{al}}{\rho_{al}(T)} + \frac{m_{ox}}{\rho_{ox}(T)}\right)^{1/3} \tag{6.3}$$

Dans la suite, nous ne faisons plus apparaître la dépendance des masses volumiques en la température car, dans ce travail, celle de la goutte en combustion est supposée constante, égale à sa température de saturation. Nous avons donc : $\rho_{al} = \rho_{al}\left(T_{sat}\right)$ et $\rho_{ox} = \rho_{ox}\left(T_{sat}\right)$.
En conservant la notation des chapitres précédents, les termes $\mathbf{u_g}$ et $T_g$ correspondent au vecteur vitesse et à la température du gaz.

## 6.2 Le modèle Multi-Fluide bicomposant

### 6.2.1 Passage à l'étape semi-cinétique

Suivant la même démarche que la dérivation du modèle semi-cinétique conditionné par la variable taille, une réduction de l'espace des phases est proposée. En prenant en compte une NDF présumée sur la vitesse et la température puis en considérant des moments en vitesse et en température, l'espace des phases ne dépend plus que de la composition des gouttes. Des moments sur la vitesse et la température conditionnés par $(m_{al}, m_{ox})$ sont ainsi définis de la façon suivante :

$$\forall \phi, \quad \overline{\phi} = n^{-1} \int_T \int_{\mathbf{u}} \phi f \mathrm{d}\mathbf{u}\mathrm{d}T \tag{6.4}$$

où $n = \int\int f \,\mathrm{d}\mathbf{u}\mathrm{d}T$ est la concentration en nombre des gouttes. Comme précisé auparavant, la température est la même pour les deux composants de la goutte. Comme donnée par l'Eq.(2.13), il est alors possible de définir une énergie interne par unité de masse $e$ telle que : $(m_{al} + m_{ox})\overline{e} = m_{al}\overline{e_{al}} + m_{ox}\overline{e_{ox}}$. La fermeture du système est obtenue à l'aide d'une hypothèse monocinétique :

[HV1] Pour $(t, \mathbf{x})$ et une composition donnée $(m_{al}, m_{ox})$, il n'y a qu'une seule vitesse $\overline{\mathbf{u}}(t, \mathbf{x}, m_{al}, m_{ox})$ et la dispersion en vitesse est nulle dans chaque direction.

[HT1] Pour $(t, \mathbf{x})$ et une composition donnée $(m_{al}, m_{ox})$, il n'y a qu'une seule température $\overline{T}(t, \mathbf{x}, m_{al}, m_{ox})$ et la dispersion sur la température est nulle.

La NDF est dorénavant uniquement conditionnée par la composition de la goutte :

$$f(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}, T, m_{al}, m_{ox}) = n(t, \mathbf{x}, m_{al}, m_{ox})\delta(\mathbf{u} - \overline{\mathbf{u}}(t, \mathbf{x}, m_{al}, m_{ox}))\delta(T - \overline{T}(t, \mathbf{x}, m_{al}, m_{ox})) \tag{6.5}$$

Le support de la NDF est réduit à un sous-espace de dimension deux paramétré par les masses des deux composants de la goutte. On intègre l'équation cinétique de la manière suivante :

$$\int_T \int_{\mathbf{u}} \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{u} \\ e \end{pmatrix} \text{Eq. (6.1)} \,\mathrm{d}\mathbf{u}\mathrm{d}T \tag{6.6}$$

Finalement, cette étape mène au système d'équations de conservation appelé modèle semi-cinétique :

$$\begin{cases} \partial_t n + \partial_{\mathbf{x}}(n\overline{\mathbf{u}}) &= \partial_{m_{al}}(n\overline{\dot{m}_{al}}) + \partial_{m_{ox}}(n\overline{\dot{m}_{ox}}) \\ \partial_t(n\overline{\mathbf{u}}) + \partial_{\mathbf{x}}(n\overline{\mathbf{u}} \otimes \overline{\mathbf{u}}) &= \partial_{m_{al}}(n\overline{\dot{m}_{al}}\overline{\mathbf{u}}) + \partial_{m_{ox}}(n\overline{\dot{m}_{ox}}\overline{\mathbf{u}}) + n\overline{\mathbf{F}} \\ \partial_t(n\overline{e}) + \partial_{\mathbf{x}}(n\overline{e}\overline{\mathbf{u}}) &= \partial_{m_{al}}(n\overline{\dot{m}_{al}}\overline{e}) + \partial_{m_{ox}}(n\overline{\dot{m}_{ox}}\overline{e}) + n\overline{\mathrm{H}} \end{cases} \tag{6.7}$$

Dans la suite de nos développements, nous ne considérons plus les échanges de masse pour l'alumine afin d'alléger l'écriture des systèmes d'équations. D'ailleurs, nous n'avons pas proposé de modèles de combustion permettant de décrire la rétrodiffusion des oxydes d'aluminium vers la surface de la goutte ni donné une quelconque expression au terme $\dot{m}_{ox}$ mais le formalisme proposé peut aisément être étendu à ce cas.

### 6.2.2 Dérivation du modèle bicomposant

#### 6.2.2.1 Introduction des sections 2D pour le pavage de l'espace des masses

En s'inspirant de l'approche Multi-Fluide classique basée sur un conditionnement sur la variable taille [Laurent and Massot, 2001], nous proposons une nouvelle méthode MF reposant sur une discrétisation de type volumes finis de l'espace des masses telle que $0 = \mu_0^{al} < ... < \mu_k^{al} < ... < \mu_{\mathrm{N_{al}}}^{al}$ et $0 = \mu_0^{ox} < ... < \mu_j^{ox} < ... < \mu_{\mathrm{N_{ox}}}^{ox}$ comme illustré en Fig.(6.1).
Notons que $\mathrm{N_{al}}$ et $\mathrm{N_{ox}}$ sont respectivement le nombre de sections selon les espaces des masses $m_{al}$ et $m_{ox}$. Un système d'équations de conservation peut être obtenu pour chaque surface de masse $[\mu_{k-1}^{al}, \mu_k^{al}[\times[\mu_{j-1}^{ox}, \mu_j^{ox}[$, appelée section 2D.
L'ensemble des gouttes bicomposants dans une section 2D sont donc décrites comme un "fluide" pour lequel des équations de conservation sont écrites ; les sections 2D échangent de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie entre elles et avec la phase gazeuse.

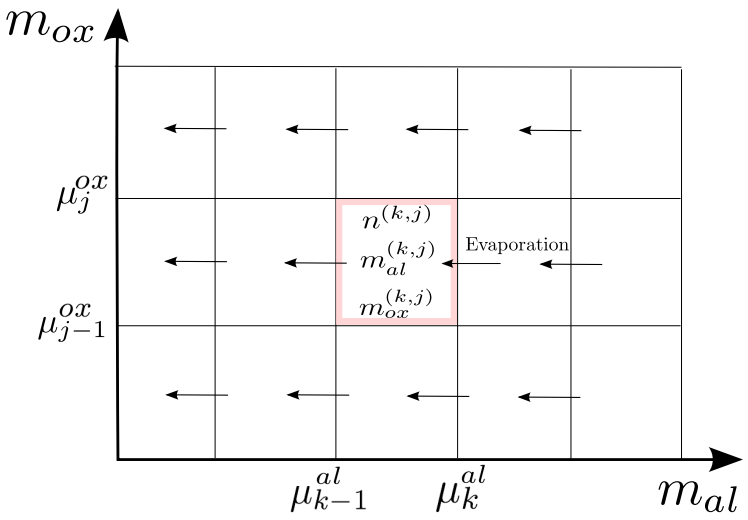


**FIGURE 6.1** – *Discrétisation de l'espace des masses et illustration des flux entre sections dans le cas de l'évaporation de l'aluminium*

Une des hypothèses principales de l'approche MF est de fixer un profil de $n$ dans chaque section 2D comme une fonction qui dépend uniquement de la composition $(m_{al}, m_{ox})$. Une première méthode consiste à ne prendre en compte que les moments en masse d'ordre 1, $m_{al}^{(k,j)}$ et $m_{ox}^{(k,j)}$, qui sont respectivement les concentrations massiques d'aluminium et d'alumine dans la section $(k, j)$. Dans le cadre de l'approche MF conditionnée par la taille, la méthode à un seul moment en taille (cf. §4.2.2.1) a été éprouvée mais elle nécessite un nombre important de sections pour décrire avec précision la distribution en taille. A précision donnée, le passage à la méthode à deux moments en taille a permis de réduire le nombre de sections en améliorant la description au sein de chaque section.
En retenant la même stratégie que l'approche à deux moments en taille proposée dans [Laurent et al., 2015], une méthode à deux moments en masse est possible.
Nous choisissons un moment d'ordre 0, $n^{(k,j)}$, qui représente la concentration en nombre de l'ensemble des gouttes contenues dans une section 2D et les deux moments en masse d'ordre 1 présentés précédemment :

$$n^{(k,j)}(t,\mathbf{x}) = \int_{\mu_{j-1}^{ox}}^{\mu_j^{ox}} \int_{\mu_{k-1}^{al}}^{\mu_k^{al}} n(t,\mathbf{x},m_{al},m_{ox})\mathrm{d}m_{al}\mathrm{d}m_{ox} \tag{6.8}$$

$$m_{al}^{(k,j)}(t,\mathbf{x}) = \int_{\mu_{j-1}^{ox}}^{\mu_j^{ox}} \int_{\mu_{k-1}^{al}}^{\mu_k^{al}} m_{al}\ n(t,\mathbf{x},m_{al},m_{ox})\mathrm{d}m_{al}\mathrm{d}m_{ox} \tag{6.9}$$

$$m_{ox}^{(k,j)}(t,\mathbf{x}) = \int_{\mu_{j-1}^{ox}}^{\mu_j^{ox}} \int_{\mu_{k-1}^{al}}^{\mu_k^{al}} m_{ox}\ n(t,\mathbf{x},m_{al},m_{ox})\mathrm{d}m_{al}\mathrm{d}m_{ox} \tag{6.10}$$

Enfin, nous proposons de définir $n$ comme le produit de la concentration en nombre et de deux fonctions indépendantes $\kappa_{al}(m_{al})$ et $\kappa_{ox}(m_{ox})$ qui définissent le profil de la composition au sein de chaque section 2D :

$$n(t,\mathbf{x},m_{al},m_{ox}) = n^{(k,j)}(t,\mathbf{x})\kappa_{al}^{(k,j)}(m_{al})\kappa_{ox}^{(k,j)}(m_{ox}), \quad (m_{al},m_{ox}) \in [\mu_{k-1}^{al},\mu_k^{al}[\times[\mu_{j-1}^{ox},\mu_j^{ox}[ \tag{6.11}$$

Par définition, nous avons :

$$\int_{\mu_{j-1}^{ox}}^{\mu_j^{ox}} \kappa_{ox}^{(k,j)}(m_{ox})\mathrm{d}m_{ox} = \int_{\mu_{k-1}^{al}}^{\mu_k^{al}} \kappa_{al}^{(k,j)}(m_{al})\mathrm{d}m_{al} = 1 \tag{6.12}$$

et

$$\int_{\mu_{k-1}^{al}}^{\mu_k^{al}} m_{al}\ \kappa_{al}^{(k,j)}(m_{al})\mathrm{d}m_{al} = \frac{m_{al}^{(k,j)}}{n^{(k,j)}} \tag{6.13}$$

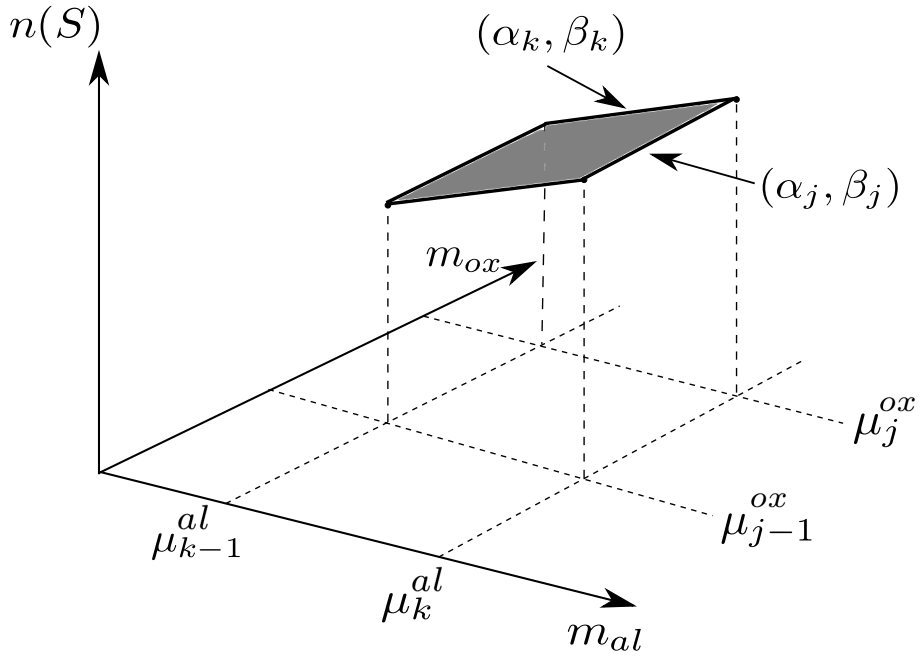


**FIGURE 6.2** – *Reconstructions affines dans l'espace des phases de la composition massique*

$$\int_{\mu_{j-1}^{ox}}^{\mu_j^{ox}} m_{ox}\ \kappa_{ox}^{(k,j)}(m_{ox})\mathrm{d}m_{ox} = \frac{m_{ox}^{(k,j)}}{n^{(k,j)}} \tag{6.14}$$

Ainsi, la concentration massique totale des gouttes s'écrit :

$$\begin{aligned} m^{(k,j)}(t,\mathbf{x}) &= \int_{\mu_{j-1}^{ox}}^{\mu_j^{ox}} \int_{\mu_{k-1}^{al}}^{\mu_k^{al}} (m_{al}+m_{ox})\ n(t,\mathbf{x},m_{al},m_{ox})\mathrm{d}m_{al}\mathrm{d}m_{ox} \\ &= m_{al}^{(k,j)} + m_{ox}^{(k,j)} \end{aligned} \tag{6.15}$$

#### 6.2.2.2 Reconstruction affine pour les sections 2D

Il nous faut définir un profil présumé pour les fonctions de distribution en masse $\kappa_{al}^{(k,j)}$ et $\kappa_{ox}^{(k,j)}$. Nous reprenons l'idée d'une reconstruction continue sur la section et affine par morceaux (sinon nulle) sur chaque intervalle $[\mu_{k-1}^{al}, \mu_k^{al}[$ ou $[\mu_{j-1}^{ox}, \mu_j^{ox}[$ comme présenté dans §5.1.2. Nous avons pour $\kappa_{al}^{(k,j)}$ :

$$\begin{aligned} &\kappa_{al}(m_{al}) = 0, \quad m_{al} \in [\mu_{k-1}^{al}, \mu_a] \quad \text{ou} \quad m_{al} \in [\mu_b, \mu_k^{al}[ \\ &\kappa_{al}(m_{al}) = \alpha_k + (\beta_k - \alpha_k)\frac{m_{al}-\mu_a}{\mu_b-\mu_a}, \quad m_{al} \in [\mu_a, \mu_b] \end{aligned} \tag{6.16}$$

L'écriture de la fonction de distribution en masse $\kappa_{ox}^{(k,j)}$ adopte le même formalisme.
Au même titre que la méthode MF à deux moments en taille, des conditions de réalisabilité sur les moments d'ordre 0 et 1 doivent être remplies pour l'approche bicomposant. Elles sont au nombre de deux, une pour chaque composant de la goutte :

$$n^{(k,j)} > 0, \quad \mu_{j-1}^{ox} < \frac{m_{ox}^{(k,j)}}{n^{(k,j)}} < \mu_j^{ox}, \qquad \mu_{k-1}^{al} < \frac{m_{al}^{(k,j)}}{n^{(k,j)}} < \mu_k^{al}$$

ou (6.17)

$$n^{(k,j)} = 0, \quad m_{ox}^{(k,j)} = 0,\ m_{al}^{(k,j)} = 0$$

#### 6.2.2.3 L'étape d'inversion : Calcul analytique des coefficients de la reconstruction à partir des moments d'ordre 0 et 1

A priori, le coût calcul nécessaire à l'étape de reconstruction des moments $(n^{(k,j)}, m_{al}^{(k,j)}, m_{ox}^{(k,j)})$ est loin d'être négligeable car l'espace des phases étudié est cette fois de dimension deux selon $m_{al}$ et $m_{ox}$. Cependant, à la différence de l'inversion des moments d'ordre 0 et 3/2 de la méthode TSM-MF qui emploie une stratégie numérique dédiée (cf. §5.1.1.2 et §5.1.2.2), l'inversion alliant des moments d'ordre 0 et 1 à une reconstruction est très avantageuse. En effet, des solutions analytiques sont obtenues pour les trois situations possibles comme illustré en Fig.(6.3). Ces dernières sont déduites de telle manière à assurer la positivité de la NDF et les conditions données par les Eq.(6.35), (6.36) et (6.37). Nous prenons le cas de la reconstruction affine pour l'espace des phases du composant aluminium. La même démarche est applicable à l'alumine.

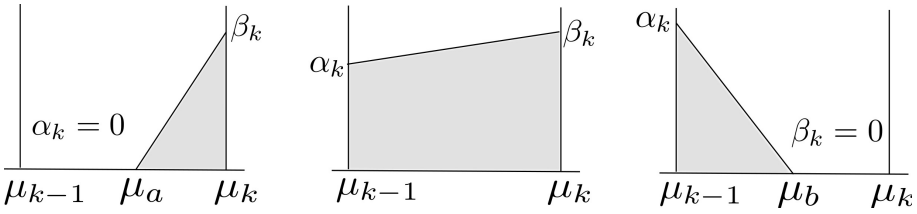


**FIGURE 6.3** – *Situations possibles pour la reconstruction affine avec les moments d'ordre 0 et 1 respectant les conditions de réalisabilité*

Les trois cas sont définis par :

a) Pour $\mu_k^{al} > m_{al}^{(k)} > n^{(k,j)} \dfrac{(2\mu_k^{al} + \mu_{k-1}^{al})}{3}$, nous avons :

$$\begin{cases} \mu_a = \dfrac{3m_{al}^{(k)}}{n^{(k,j)}} - 2\mu_k^{al}, \qquad \mu_b = \mu_k^{al} \\ \\ \alpha_k = 0, \qquad \beta_k = \dfrac{2n^{(k,j)}}{3(\mu_k^{al} n^{(k,j)} - m_{al}^{(k)})} \end{cases} \tag{6.18}$$

b) Pour $n^{(k,j)} \dfrac{(2\mu_{k-1}^{al} + \mu_k^{al})}{3} \leq m_{al}^{(k)} \leq n^{(k,j)} \dfrac{(2\mu_k^{al} + \mu_{k-1}^{al})}{3}$, nous avons :

$$\begin{cases} \mu_a = \mu_{k-1}^{al}, \qquad \mu_b = \mu_k^{al} \\ \\ \alpha_k = \dfrac{2}{(\mu_k^{al} - \mu_{k-1}^{al})^2} \left[ (2\mu_k^{al} + \mu_{k-1}^{al}) - 3\dfrac{m_{al}^{(k)}}{n^{(k,j)}} \right] \\ \\ \beta_k = \dfrac{2}{(\mu_k^{al} - \mu_{k-1}^{al})^2} \left[ 3\dfrac{m_{al}^{(k)}}{n^{(k,j)}} - (2\mu_{k-1}^{al} + \mu_k^{al}) \right] \end{cases} \tag{6.19}$$

c) Pour $\mu_{k-1}^{al} < m_{al}^{(k)} < n^{(k,j)} \dfrac{(2\mu_{k-1}^{al} + \mu_k^{al})}{3}$, nous avons :

$$\begin{cases} \mu_a = \mu_{k-1}^{al}, \qquad \mu_b = \dfrac{3m_{al}^{(k)}}{n^{(k,j)}} - 2\mu_{k-1}^{al} \\ \\ \alpha_k = \dfrac{2n^{(k,j)}}{3(m_{al}^{(k)} - \mu_{k-1}^{al} n^{(k,j)})}, \qquad \beta_k = 0 \end{cases} \tag{6.20}$$

### 6.2.3 Système MF bicomposant final

Deux hypothèses sont requises sur la vitesse et la température pour fermer le modèle MF bicomposant :

[HV2] Pour chaque section 2D, la vitesse ne dépend pas de la composition de la goutte, on écrit alors $\overline{\mathbf{u}}(t, \mathbf{x}, m_{al}, m_{ox}) = \mathbf{u}^{(k,j)}(t, \mathbf{x})$.

[HE2] Pour chaque section 2D, la température ne dépend pas de la composition de la goutte $\overline{T}(t,\mathbf{x},m_{al},m_{ox}) = T^{(k,j)}(t,\mathbf{x})$. Il existe également une énergie interne unique pour la goutte $e^{(k,j)}(t,\mathbf{x})$ qui ne dépend pas de la composition.

Finalement, le système diphasique d'équations de conservation décrivant le spray bicomposant couplé à une description eulérienne du gaz est :

$$\left\{\begin{array}{ll}
\partial_t\rho_g + \partial_{\mathbf{x}}.(\rho_g\mathbf{u_g}) & = \sum_{j=1}^{\mathrm{N_{ox}}}\sum_{k=1}^{\mathrm{N_{al}}} M_{al\to g}^{(k,j)} \\
\partial_t\left(\rho_g\mathbf{u_g}\right) + \partial_{\mathbf{x}}.\left(\rho_g\mathbf{u_g}\otimes\mathbf{u_g}+p\right) & = \sum_{j=1}^{\mathrm{N_{ox}}}\sum_{k=1}^{\mathrm{N_{al}}}\left(\dot{m}_{al}^{(k,j)}\mathbf{u}^{(k,j)} - \mathbf{F}^{(k,j)}\right) \\
\partial_t\left(\rho_g E_g\right) + \partial_{\mathbf{x}}.\left(\left(\rho_g E_g + p\right)\mathbf{u_g}\right) & = \sum_{j=1}^{\mathrm{N_{ox}}}\sum_{k=1}^{\mathrm{N_{al}}}\left(\dot{m}_{al}^{(k,j)}\left(h_p^{(k,j)} + L_v + \frac{1}{2}||\mathbf{u_g}||^2\right)\right) \\
 & \quad -\sum_{j=1}^{\mathrm{N_{ox}}}\sum_{k=1}^{\mathrm{N_{al}}}\left(\mathbf{F^{(k,j)}}\mathbf{u}^{(k,j)} + H^{(k,j)}\right) \\
\partial_t n^{(k,j)} + \partial_{\mathbf{x}}.(n^{(k,j)}\mathbf{u}^{(k,j)}) & = \mathcal{N}^{(k+1,j)} - \mathcal{N}^{(k,j)} \\
\partial_t m_{al}^{(k,j)} + \partial_{\mathbf{x}}.(m_{al}^{(k,j)}\mathbf{u}^{(k,j)}) & = \left(\mathcal{M}_{al}^{(k+1,j)} - \mathcal{M}_{al}^{(k,j)}\right) - M_{al\to g}^{(k,j)} \\
\partial_t m_{ox}^{(k,j)} + \partial_{\mathbf{x}}.(m_{ox}^{(k,j)}\mathbf{u}^{(k,j)}) & = \left(\mathcal{M}_{ox}^{(k+1,j)} - \mathcal{M}_{ox}^{(k,j)}\right) \\
\partial_t(m^{(k,j)}\mathbf{u}^{(k,j)}) + \partial_{\mathbf{x}}.(m^{(k,j)}\mathbf{u}^{(k,j)}\otimes\mathbf{u}^{(k,j)}) & = \mathbf{F}^{(k,j)} + \left(\mathcal{M}^{(k+1,j)}\mathbf{u}^{(k+1,j)} - \mathcal{M}^{(k,j)}\mathbf{u}^{(k,j)}\right) \\
 & \quad -M_{al\to g}^{(k,j)}\mathbf{u}^{(k,j)} \\
\partial_t(m^{(k,j)}e^{(k,j)}) + \partial_{\mathbf{x}}.(m^{(k,j)}e^{(k,j)}\mathbf{u}^{(k,j)}) & = \mathrm{H}^{(k,j)} + \left(\mathcal{M}^{(k+1,j)}e^{(k+1,j)} - \mathcal{M}^{(k,j)}e^{(k,j)}\right) \\
 & \quad -M_{al\to g}^{(k,j)}e^{(k,j)}
\end{array}\right. \tag{6.21}$$

Les $\mathrm{N_{al}}\times\mathrm{N_{ox}}$ systèmes fluides sont couplés au système gaz uniquement par les termes sources. Pour les équations de la phase gazeuse, on reprend en partie les équations d'Euler utilisées dans l'Eq.(5.17). Cependant, sans un choix sur le modèle de combustion utilisé, nous ne donnons pas ici les équations de transport des espèces composant la phase gazeuse.

#### 6.2.3.1 Expression du terme source lié à la traînée

Les termes $\mathbf{F}^{(k,j)}$, $\mathrm{H}^{(k,j)}$ sont obtenus à partir des quantités $\mathbf{F}_p$, $\mathrm{H}_p$ intégrées sur chaque section et pour des fonctions de reconstruction données. La force de traînée s'écrit :

$$\mathbf{F}^{(k,j)} = \int_{\mu_{k-1}^{al}}^{\mu_k^{al}}\int_{\mu_{j-1}^{ox}}^{\mu_j^{ox}} \mathbf{F}_p\; n(t,\mathbf{x},m_{al},m_{ox})\mathrm{d}m_{al}\mathrm{d}m_{ox} \tag{6.22}$$

En régime de Stokes, le terme de traînée a la forme suivante :

$$\mathbf{F}^{(k,j)} = \frac{18\mu_g(\mathbf{u_g}-\mathbf{u}^{(k,j)})}{\rho_p}\int_{\mu_{k-1}^{al}}^{\mu_k^{al}}\int_{\mu_{j-1}^{ox}}^{\mu_j^{ox}} \frac{(m_{al}+m_{ox})n(t,\mathbf{x},m_{al},m_{ox})}{d^2(m_{al},m_{ox})}\mathrm{d}m_{al}\mathrm{d}m_{ox} \tag{6.23}$$

En utilisant l'expression du diamètre d'une goutte bicomposant donnée en Eq.(6.3), on obtient :

$$\mathbf{F}^{(k,j)} = \frac{18\pi^{2/3}\mu_g(\mathbf{u_g}-\mathbf{u}^{(k,j)})n^{(k,j)}}{6^{2/3}\rho_p}\int_{\mu_{k-1}^{al}}^{\mu_k^{al}}\int_{\mu_{j-1}^{ox}}^{\mu_j^{ox}} \frac{(m_{al}+m_{ox})\kappa_{al}(m_{al})\kappa_{ox}(m_{ox})}{(\frac{m_{al}}{\rho_{al}}+\frac{m_{ox}}{\rho_{ox}})^{2/3}}\mathrm{d}m_{al}\mathrm{d}m_{ox} \tag{6.24}$$

Le terme source $M_{al\to g}^{(k,j)}$ représente l'échange de masse d'aluminium de la section $(k,j)$ avec la phase gazeuse. Ce dernier est calculé en suivant la même stratégie que celle présentée ci-dessus pour la force de traînée. Dans le cas où la rétrodiffusion d'oxydes d'aluminium est considérée, il faut introduire un terme d'échange de masse supplémentaire, noté $M_{g\to ox}^{(k,j)}$, qui correspond à la condensation et au dépôt des oxydes à la surface de la goutte alimentant le lobe d'alumine liquide.

#### 6.2.3.2 Expression des termes sources d'échanges entre sections

**Evaporation de l'aluminium**

Les termes $\mathcal{N}^{(k+1,j)}$ et $\mathcal{N}^{(k,j)}$ sont les termes d'échange de concentration en nombre entre les sections $(k+1,j)$ et $(k,j)$. Les termes $\mathcal{M}_{al}^{(k+1,j)}$ et $\mathcal{M}_{al}^{(k,j)}$ sont les termes d'échange de concentrations massiques d'aluminium entre les sections. Ces termes sont calculés à partir de l'intégration de la quantité $\overline{\dot{m}_{al}}$ sur la section 2D.

**Cas où la rétrodiffusion/condensation d'alumine est prise en compte**

On introduit alors les termes $\mathcal{N}^{(k,j)}$ et $\mathcal{N}^{(k,j+1)}$ pour les flux d'échanges de concentration en nombre entre les sections $(k,j)$ et $(k,j+1)$. On ajoute également les termes $\mathcal{M}_{ox}^{(k,j)}$ et $\mathcal{M}_{ox}^{(k,j+1)}$ qui sont les termes d'échange de concentrations massiques d'alumine entre les sections. Ces termes sont calculés à partir de l'intégration de la quantité $\overline{\dot{m}_{ox}}$ sur la section 2D.

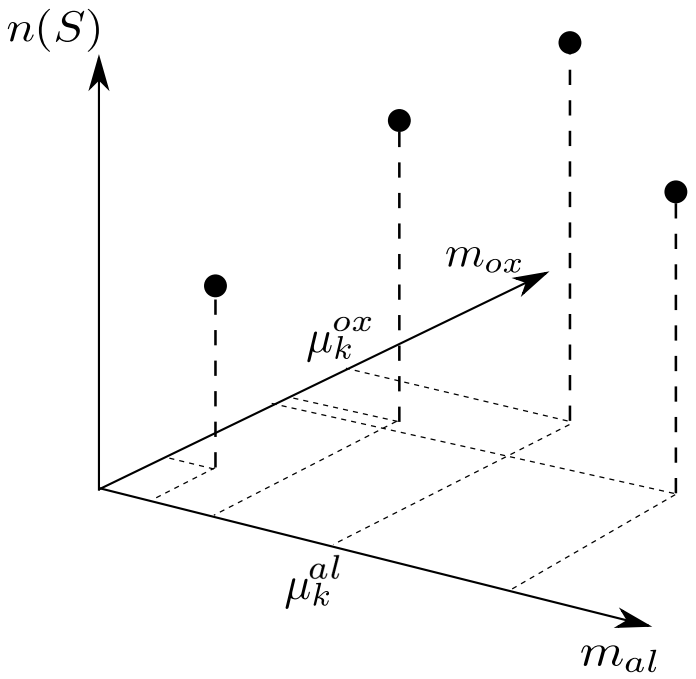


**FIGURE 6.4** – *Discrétisation dans l'espace des masses pour la méthode Multi-Classe bicomposant*

## 6.3 Méthode Multi-Classe bicomposant

Dans cette partie, nous présentons brièvement la dérivation du système d'équations obtenu pour une approche dite Multi-Classe bicomposant. Comme présentée dans §4.1.3, la méthode repose sur un échantillonnage de la NDF. La Fig.(6.4) illustre les $\mathrm{N_{sample}}$ fonctions Dirac utilisées pour discrétiser $\mathrm{N_{al}}$ valeurs $\{\mu_1^{al}, ..., \mu_k^{al}, ..., \mu_{\mathrm{N_{al}}}^{al}\}$ et $\mathrm{N_{ox}}$ valeurs $\{\mu_1^{ox}, ..., \mu_k^{ox}, ..., \mu_{\mathrm{N_{ox}}}^{ox}\}$ de l'espace des masses pour lesquelles des vitesses moyennes $\mathbf{u}^{(k)}$ et des températures moyennes $T^{(k)}$ sont considérées :

$$f(t,\mathbf{x},\mathbf{u},T,m_{al},m_{ox}) = \sum_{k=1}^{\mathrm{N_{sampke}}} n^{(k)}(t,\mathbf{x})\,\delta(m_{al}-\mu_k^{al}(t,\mathbf{x}))\delta(m_{ox}-\mu_k^{ox}(t,\mathbf{x})) \\ \delta(\mathbf{u}-\mathbf{u}^{(k)}(t,\mathbf{x}))\,\delta(T-T^{(k)}(t,\mathbf{x})) \tag{6.25}$$

où $n^{(k)}$ est la concentration en nombre de gouttes de l'échantillon $k$. La masse d'une goutte bicomposant de l'échantillon est donnée par : $m_p^{(k)} = \mu_k^{al} + \mu_k^{ox}$. Aussi, la concentration massique totale $m^{(k)}$ de la classe $k$ s'écrit :

$$\begin{cases} m_{al}^{(k)} = n^{(k)}\,\mu_k^{al}, \qquad m_{ox}^{(k)} = n^{(k)}\,\mu_k^{ox} \\ m^{(k)} = n^{(k)}\,m_p^{(k)} \end{cases} \tag{6.26}$$

où $m_{al}^{(k)}$ et $m_{ox}^{(k)}$ sont les concentrations massiques d'aluminium et d'alumine de l'échantillon considéré.
Le système d'équations de conservation pour une classe $(k)$ s'écrit :

$$\begin{cases} \partial_t n^{(k)} + \partial_{\mathbf{x}}.(n^{(k)}\mathbf{u}^{(k)}) & = 0 \\ \partial_t m_{al}^{(k)} + \partial_{\mathbf{x}}.(m_{al}^{(k)}\mathbf{u}^{(k)}) & = -M_{al\to g}^{(k)} \\ \partial_t m_{ox}^{(k)} + \partial_{\mathbf{x}}.(m_{ox}^{(k)}\mathbf{u}^{(k)}) & = M_{g\to ox}^{(k)} \\ \partial_t (m^{(k)}\mathbf{u}^{(k)}) + \partial_{\mathbf{x}}.(m^{(k)}\mathbf{u}^{(k)}\otimes\mathbf{u}^{(k)}) & = \mathbf{F}^{(k)} + M_{g\to ox}^{(k)}\mathbf{u_g} - M_{al\to g}^{(k)}\mathbf{u}^{(k)} \\ \partial_t (m^{(k)}e^{(k)}) + \partial_{\mathbf{x}}.(m^{(k)}e^{(k)}\mathbf{u}^{(k)}) & = \mathrm{H}^{(k)} + M_{g\to ox}^{(k)}e_g - M_{al\to g}^{(k)}e^{(k)} \end{cases} \tag{6.27}$$

où $M_{al\to g}^{(k)}$ et $M_{g\to ox}^{(k)}$ sont respectivement les termes d'échanges de masse entre l'aluminium et le gaz et entre ce dernier et l'alumine.

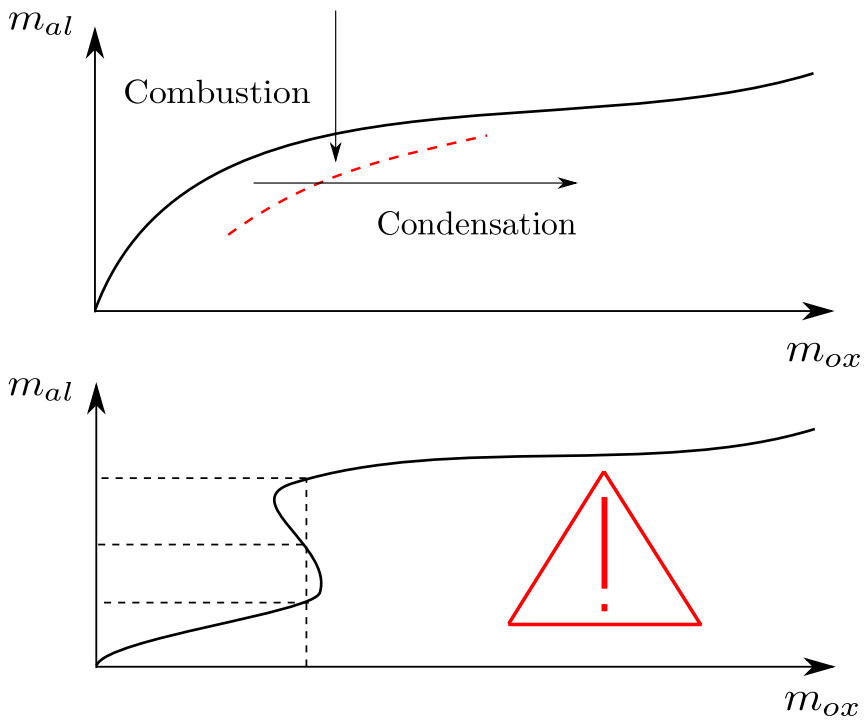


**FIGURE 6.5** – *Principe de base pour la construction de la méthode MF bicomposant simplifée : conditionnement par la masse d'alumine (en haut) et cas multi-valué qui est à éviter (en bas)*

## 6.4 Méthode MF bicomposant simplifiée : conditionnement par la masse d'alumine $m_{ox}$

### 6.4.1 Conditionnement de $m_{al}$ par $m_{ox}$ et modèle semi-cinétique

Afin de simplifier le modèle MF bicomposant, nous souhaitons réduire l'espace des phases avec un conditionnement non plus sur la composition de la goutte mais sur un seul des composants à savoir la masse d'alumine comme présenté dans la Fig.(6.5). Ce choix semble naturel car après combustion il ne reste plus que de l'oxyde, un conditionnement par l'aluminium est donc peu judicieux. De plus, la prise en compte de la bicomposition de la goutte n'est utile que pour l'étude de la combustion qui n'a lieu généralement que dans une zone très localisée du moteur. On souhaite que le nouveau modèle MF bicomposant dégénère naturellement vers l'étude de gouttes monocomposants avec un système d'équations simplifié par rapport à la méthode proposée dans §6.2 utilisant un espace des masses à deux dimensions.
En prenant en compte une NDF présumée sur la vitesse et la température puis en résolvant des corrélations $m_{ox}$/vitesse, $m_{ox}$/température et $m_{ox}/m_{al}$ l'espace des phases ne dépend plus que de la masse d'alumine. Des moments sur la vitesse, la température et la masse d'aluminium conditionnés par $m_{ox}$ sont ainsi définis par :

$$\forall \phi, \quad \overline{\phi} = n^{-1} \int_{m_{al}} \int_{T} \int_{\mathbf{u}} \phi f \, \mathrm{d}\mathbf{u}\mathrm{d}T\mathrm{d}m_{al} \tag{6.28}$$

où $n = \int\int\int f \, \mathrm{d}\mathbf{u}\mathrm{d}T\mathrm{d}m_{al}$ est la concentration en nombre des gouttes. Ici, l'énergie interne (par unité de masse) de la goutte se relie directement à la température de la goutte comme expliqué dans §6.2.1. La fermeture du système est obtenue à l'aide d'une hypothèse monocinétique par :

[HM1] Pour $(t, \mathbf{x})$ et une masse d'oxyde donnée $m_{ox}$, il n'y a qu'une masse d'aluminium possible $\overline{m_{al}}(t, \mathbf{x}, m_{ox})$ et sa dispersion est nulle.

[HV1] Pour $(t, \mathbf{x})$ et une composition donnée $m_{ox}$, il n'y a qu'une seule vitesse $\overline{\mathbf{u}}(t, \mathbf{x}, m_{ox})$ et la dispersion en vitesse est nulle dans chaque direction.

[HT1] Pour $(t, \mathbf{x})$ et une composition donnée $m_{ox}$, il n'y a qu'une seule température $\overline{T}(t, \mathbf{x}, m_{ox})$ et la dispersion sur la température est nulle.

Illustré en Fig.(6.5), le conditionnement de $m_{al}$ par $m_{ox}$ ne présente qu'une seule contrainte : il ne peut y avoir plusieurs valeurs de masse d'aluminium pour une même masse d'alumine en une même position d'espace et de temps. Cette condition doit être assurée lors de la mise en données de la granulométrie initiale. Dans §2.1, nous avons détaillé le processus d'oxydation et d'agglomération des gouttes initialement incorporées dans le propergol. La quantité d'alumine présent au sein de la goutte en début de combustion dépend de la taille initiale de la goutte. Puis, au cours de la combustion, la masse d'aluminium devient multi-valuée si la condensation d'alumine est significativement plus forte pour des gouttes contenant moins d'aluminium. Nous excluons cette situation car nous supposons que le processus dominant est l'évaporation de l'aluminium et que la production d'alumine est loin d'être prépondérant. On rappelle que la rétrodiffusion des oxydes gazeux vers la surface de la goutte n'a pas encore été démontrée au sein des MPS.

La NDF s'écrit alors :

$$\begin{aligned} f(t,\mathbf{x},\mathbf{u},T,m_{al},m_{ox}) = n(t,\mathbf{x},m_{ox})\delta(m_{al}-\overline{m_{al}}(t,\mathbf{x},m_{ox})) \\ \delta(\mathbf{u}-\overline{\mathbf{u}}(t,\mathbf{x},m_{ox}))\delta(T-\overline{T}(t,\mathbf{x},m_{ox})) \end{aligned} \tag{6.29}$$

Le support de la NDF est réduit à un sous-espace de dimension 1 paramétré par un seul des composants de la goutte. On intègre l'équation cinétique de la manière suivante :

$$\int_{m_{al}}\int_{T}\int_{\mathbf{u}} \begin{pmatrix} 1 \\ m_{al} \\ \mathbf{u} \\ e \end{pmatrix} \text{Eq. (6.1)}\, \mathrm{d}\mathbf{u}\mathrm{d}T\mathrm{d}m_{al} \tag{6.30}$$

Cette étape mène au système d'équations de conservation semi-cinétique :

$$\begin{cases} \partial_t n + \partial_{\mathbf{x}}(n\overline{\mathbf{u}}) &= \partial_{m_{ox}}(n\overline{\dot{m}_{ox}}) \\ \partial_t(n\overline{m_{al}}) + \partial_{\mathbf{x}}(n\overline{m_{al}}\,\overline{\mathbf{u}}) &= -n\overline{\dot{m}_{al}} + \partial_{m_{ox}}(n\overline{m_{al}}\,\overline{\dot{m}_{ox}}) \\ \partial_t(n\overline{\mathbf{u}}) + \partial_{\mathbf{x}}(n\overline{\mathbf{u}}\otimes\overline{\mathbf{u}}) &= \partial_{m_{ox}}(n\overline{\dot{m}_{ox}}\overline{\mathbf{u}}) + n\overline{\mathbf{F}} \\ \partial_t(n\overline{e}) + \partial_{\mathbf{x}}(n\overline{e}\,\overline{\mathbf{u}}) &= \partial_{m_{ox}}(n\overline{\dot{m}_{ox}}\overline{e}) + n\overline{\mathrm{H}} \end{cases} \tag{6.31}$$

## 6.4.2 Dérivation de la méthode MF bicomposant simplifiée

### 6.4.2.1 Discrétisation de l'espace de la masse d'alumine

Nous proposons une nouvelle méthode MF reposant sur une discrétisation de type volumes finis de l'espace des masses telle que $0 = \mu_0 < ... < \mu_j < ... < \mu_{\mathrm{N_{ox}}}$. Par la suite, on ne fait plus apparaître l'exposant *ox* pour la discrétisation de l'espace de la masse d'alumine afin de simplifier l'écriture du modèle.
Notons que $\mathrm{N_{ox}}$ est le nombre de sections dans l'espace des masses $m_{ox}$. Un système d'équations de conservation peut être obtenu pour chaque section de masse $[\mu_{j-1},\mu_j[$.
Une des hypothèses principales de l'approche MF est de fixer un profil de $n$ dans chaque section 2D comme une fonction qui dépend uniquement de la masse d'alumine $m_{ox}$.
Comme proposé pour l'approche à deux moments en taille [Dufour, 2005; Laurent et al., 2015], une méthode à deux moments en masse est possible. Nous choisissons un moment d'ordre 0, noté $n^{(j)}$, qui représente la concentration en nombre de l'ensemble des gouttes contenues dans une section et le moment en masse d'ordre 1, noté $m_{ox}^{(j)}$ :

$$n^{(j)}(t,\mathbf{x}) = \int_{\mu_{j-1}}^{\mu_j} n(t,\mathbf{x},m_{ox})\mathrm{d}m_{ox} \tag{6.32}$$

$$m_{ox}^{(j)}(t,\mathbf{x}) = \int_{\mu_{j-1}}^{\mu_j} m_{ox}\; n(t,\mathbf{x},m_{ox})\mathrm{d}m_{ox} \tag{6.33}$$

Enfin, nous proposons de définir $n$ comme le produit de la concentration en nombre et d'une fonction $\kappa_{ox}(m_{ox})$ qui définit le profil de la composition au sein de chaque section :

$$n(t,\mathbf{x},m_{ox}) = n^{(j)}(t,\mathbf{x})\kappa_{ox}^{(j)}(m_{ox}), \quad m_{ox}\in[\mu_{j-1},\mu_j[ \tag{6.34}$$

Par définition, nous avons :

$$\int_{\mu_{j-1}}^{\mu_j} \kappa_{ox}^{(j)}(m_{ox})\mathrm{d}m_{ox} = 1 \tag{6.35}$$

et

$$\int_{\mu_{j-1}}^{\mu_j} m_{ox}\ \kappa_{ox}^{(j)}(m_{ox})\mathrm{d}m_{ox} = \frac{m_{ox}^{(j)}}{n^{(j)}} \tag{6.36}$$

$$\int_{\mu_{j-1}}^{\mu_j} \overline{m_{al}}(m_{ox})\ \kappa_{ox}^{(j)}(m_{ox})\mathrm{d}m_{ox} = \frac{m_{al}^{(j)}}{n^{(j)}} \tag{6.37}$$

Ainsi, la concentration massique totale des gouttes s'écrit :

$$\begin{aligned} m^{(j)}(t,\mathbf{x}) &= \int_{\mu_{j-1}}^{\mu_j} (\overline{m_{al}}(t,\mathbf{x},m_{ox}) + m_{ox})\ n(t,\mathbf{x},m_{ox})\mathrm{d}m_{ox} \\ &= m_{al}^{(j)} + m_{ox}^{(j)} \end{aligned} \tag{6.38}$$

#### 6.4.2.2 Reconstruction affine

Il nous faut définir une fonction de forme $\kappa_{ox}^{(j)}$ pour décrire la distribution en masse au sein des sections. Nous reprenons l'idée d'une reconstruction continue et affine par morceaux (sinon nulle) sur chaque intervalle $[\mu_{j-1}, \mu_j[$ :

$$\begin{aligned} &\kappa_{ox}(m_{ox}) = 0, \quad m_{ox} \in [\mu_{j-1}, \mu_a] \quad \text{or} \quad m_{ox} \in [\mu_b, \mu_j[ \\ &\kappa_{ox}(m_{ox}) = \alpha_j + (\beta_j - \alpha_j)\frac{m_{ox} - \mu_a}{\mu_b - \mu_a}, \quad m_{ox} \in [\mu_a, \mu_b] \end{aligned} \tag{6.39}$$

Par rapport à la méthode MF bicomposant conditionnée par la composition massique, une seule condition de réalisabilité sur les moments doit être remplie pour l'approche simplifiée, nous avons :

$$\begin{aligned} &n^{(j)} > 0, \quad \mu_{j-1} < \frac{m_{ox}^{(j)}}{n^{(j)}} < \mu_j \\ &\text{ou} \\ &n^{(j)} = 0, \quad m_{ox}^{(j)} = m_{al}^{(j)} = 0 \end{aligned} \tag{6.40}$$

La stratégie d'inversion est la même que celle présentée dans §6.2.2.3. L'avantage dans le cas de la méthode MF simplifiée est que cette procédure n'est réalisée qu'une seule fois par section i.e. $\mathrm{N_{ox}}$ alors que celle du modèle MF à deux dimensions nécessite deux étapes d'inversion à réaliser sur $\mathrm{N_{al}} \times \mathrm{N_{ox}}$ sections.

### 6.4.3 Système MF bicomposant simplifié final

Trois hypothèses sont requises sur la vitesse et la température pour fermer le modèle MF bicomposant simplifié :

[HM2] Pour chaque section, la concentration massique d'aluminium ne dépend pas de la masse d'alumine $n^{(j)}\overline{m_{al}}(t,\mathbf{x},m_{ox}) = {m_{al}}^{(j)}(t,\mathbf{x})$.

[HV2] Pour chaque section, la vitesse ne dépend pas de la masse d'alumine $\overline{\mathbf{u}}(t,\mathbf{x},m_{ox}) = \mathbf{u}^{(j)}(t,\mathbf{x})$ et sa dispersion est nulle dans toutes les directions.

[HE2] Pour chaque section, la température ne dépend pas de la masse d'alumine, on écrit alors $\overline{T}(t,\mathbf{x},m_{ox}) = T^{(j)}(t,\mathbf{x})$. Nous avons également une énergie interne unique pour la goutte $e^{(j)}(t,\mathbf{x})$ qui ne dépend pas de la masse d'alumine.

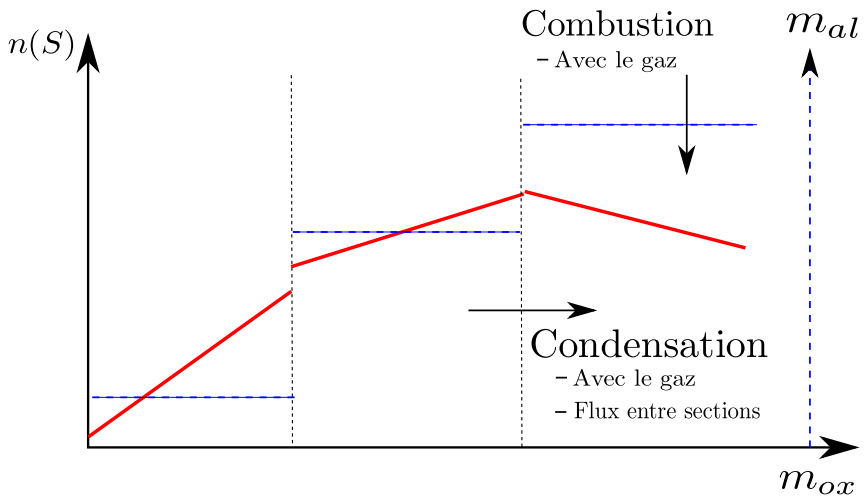


**FIGURE 6.6** – *Illustration de la reconstruction affine pour la méthode MF bicomposant simplifiée avec l'hypothèse d'une valeur constante de la masse d'aluminium par section.*

Dans le cas général avec alimentation du lobe d'alumine, cas où $\dot{m}_{ox} \neq 0$, le système d'équations de conservation de la section $j$ s'écrit :

$$\left\{\begin{array}{ll}
\partial_t n^{(j)} + \partial_{\mathbf{x}}.(n^{(j)}\mathbf{u}^{(j)}) & = \mathcal{N}_{ox}^{(j-1,j)} - \mathcal{N}_{ox}^{(j,j)} \\
\partial_t m_{ox}^{(j)} + \partial_{\mathbf{x}}.(m_{ox}^{(j)}\mathbf{u}^{(j)}) & = \left(\mathcal{M}_{ox}^{(j-1)} - \mathcal{M}_{ox}^{(j)}\right) - M_{g\to ox}^{(j)} \\
\partial_t m_{al}^{(j)} + \partial_{\mathbf{x}}.(m_{al}^{(j)}\mathbf{u}^{(j)}) & = \left(\mathcal{M}_{al}^{(j-1)} - \mathcal{M}_{al}^{(j)}\right) - M_{al\to g}^{(j)} \\
\partial_t (m^{(j)}\mathbf{u}^{(j)}) + \partial_{\mathbf{x}}.(m^{(j)}\mathbf{u}^{(j)}\otimes\mathbf{u}^{(j)}) & = \mathbf{F}^{(j)} + \left(\mathcal{M}_{ox}^{(j-1)}\mathbf{u}^{(j-1)} - \mathcal{M}_{ox}^{(j)}\mathbf{u}^{(j)}\right) \\
& \quad + \left(\mathcal{M}_{al}^{(j-1)}\mathbf{u}^{(j-1)} - \mathcal{M}_{al}^{(j)}\mathbf{u}^{(j)}\right) \\
& \quad + M_{g\to ox}^{(j)}\mathbf{u_g} - M_{al\to g}^{(j)}\mathbf{u}^{(j)} \\
\partial_t (m^{(j)}e^{(j)}) + \partial_{\mathbf{x}}.(m^{(j)}e^{(j)}\mathbf{u}^{(j)}) & = \mathrm{H}^{(j)} + \left(\mathcal{M}_{ox}^{(j-1)}e^{(j-1)} - \mathcal{M}_{ox}^{(j)}e^{(j)}\right) \\
& \quad + \left(\mathcal{M}_{al}^{(j-1)}e^{(j-1)} - \mathcal{M}_{al}^{(j)}e^{(j)}\right) \\
& \quad + M_{g\to ox}^{(j)}e_g - M_{al\to g}^{(j)}e^{(j)}
\end{array}\right. \tag{6.41}$$

#### 6.4.3.1 Expression du terme source lié à la traînée

En reprenant la forme de la force de traînée en régime de Stokes donnée en Eq.(6.24), nous obtenons pour la méthode MF simplifiée :

$$\mathbf{F^{(j)}} = \frac{18\pi^{2/3}\mu_g(\mathbf{u_g}-\mathbf{u})n^{(j)}}{6^{2/3}\rho_p}\int_{\mu_{j-1}}^{\mu_j}\frac{(\overline{m_{al}}+m_{ox})\kappa_{ox}^{(j)}}{(\frac{\overline{m_{al}}}{\rho_{al}}+\frac{m_{ox}}{\rho_{ox}})^{2/3}}\mathrm{d}m_{ox} \tag{6.42}$$

#### 6.4.3.2 Expression des termes sources d'échange avec le gaz et des flux entre sections pour l'espèce alumine

Les termes $\mathcal{N}_{ox}^{(j-1)}$ et $\mathcal{N}_{ox}^{(j)}$ sont les termes d'échange de concentration en nombre entre les sections $(j-1)$ et $(j)$. Ces termes sont calculés grâce à l'intégrale suivante :

$$\begin{aligned}\int_{\mu_{j-1}}^{\mu_j}\partial_{m_{ox}}\left(n\overline{\dot{m}_{ox}}\right)\mathrm{d}m_{ox} = \quad & n^{(j)}\overline{\dot{m}_{ox}}(\mu_j) - n^{(j-1)}\overline{\dot{m}_{ox}}(\mu_{j-1}) \\ & = \mathcal{N}_{ox}^{(j)} - \mathcal{N}_{ox}^{(j-1)}\end{aligned} \tag{6.43}$$

Le terme $\overline{\dot{m}_{ox}}$ et plus particulièrement ses valeurs aux bornes de la section sont déterminées à partir de l'expression que peut adopter le terme $\dot{m}_{ox}$ dans le modèle de combustion adéquat.

Les termes $\mathcal{M}_{ox}^{(j-1)}$ et $\mathcal{M}_{ox}^{(j)}$ sont les termes d'échange de concentrations massiques d'alumine entre les sections $(j-1)$ et $(j)$. Le terme $M_{g\to ox}^{(j)}$ représente l'échange de concentration de masse entre le gaz et l'alumine liquide. Ces termes sont calculés à partir d'une intégration par parties :

$$\begin{aligned}\int_{\mu_{j-1}}^{\mu_j} m_{ox}\partial_{m_{ox}}\left(n\overline{\dot{m}_{ox}}\right)\mathrm{d}m_{ox} &= m_{ox}^{(j)}\overline{\dot{m}_{ox}}(\mu_j) - m_{ox}^{(j-1)}\overline{\dot{m}_{ox}}(\mu_{j-1}) \\ &\quad -n^{(j)}\int_{\mu_{j-1}}^{\mu_j}\overline{\dot{m}_{ox}}\partial_{m_{ox}}\left(m_{ox}\right)\mathrm{d}m_{ox} \\ &= \mathcal{M}_{ox}^{(j)} - \mathcal{M}_{ox}^{(j-1)} - M_{g\to ox}^{(j)}\end{aligned} \tag{6.44}$$

#### 6.4.3.3 Expression des termes sources d'échange avec le gaz et des flux entre sections pour l'espèce aluminium

Les termes $\mathcal{M}_{al}^{(j-1)}$ et $\mathcal{M}_{al}^{(j)}$ sont les termes d'échange de concentrations massiques d'aluminium entre les sections. Notons que ces flux ne sont pas dus à l'évaporation de l'aluminium ; c'est le conditionnement de la masse d'aluminium par la masse d'alumine qui est à l'origine de ces flux entre sections comme illustré en Fig.(6.6). Suivant la même démarche que pour le calcul des flux de l'espèce alumine, nous avons :

$$\begin{aligned}\int_{\mu_{j-1}}^{\mu_j}\partial_{m_{ox}}\left(n\overline{m_{al}}\overline{\dot{m}_{ox}}\right)\mathrm{d}m_{ox} &= m_{al}^{(j)}\overline{\dot{m}_{ox}}(\mu_j) - m_{al}^{(j-1)}\overline{\dot{m}_{ox}}(\mu_{j-1}) \\ &= \mathcal{M}_{al}^{(j)} - \mathcal{M}_{al}^{(j-1)}\end{aligned} \tag{6.45}$$

Le terme source d'échange entre le gaz et l'espèce aluminium est noté $M_{al\to g}^{(j)}$. Il se calcule :

$$\begin{aligned}\int_{\mu_{j-1}}^{\mu_j} n\overline{\dot{m}_{al}}\mathrm{d}m_{ox} &= n^{(j)}\int_{\mu_{j-1}}^{\mu_j}\overline{\dot{m}_{al}}\kappa_{ox}^{(j)}\mathrm{d}m_{ox} \\ &= M_{al\to g}^{(j)}\end{aligned} \tag{6.46}$$

L'hypothèse [HM2] selon laquelle la quantité $\overline{m_{al}}$ est constante dans chaque section ne garantit pas que $\overline{\dot{m}_{al}}$ le soit. Sa forme est alors donnée par le modèle de combustion.

#### 6.4.3.4 Système simplifié pour un cas de combustion sans condensation d'alumine

Quand il n'y a pas de création d'alumine liquide, cas où $\dot{m}_{ox} = 0$ , le système d'équations de conservation de la section $j$ peut être réduit. Il s'exprime sous la forme :

$$\begin{cases}\partial_t n^{(j)} + \partial_{\mathbf{x}}.(n^{(j)}\mathbf{u}^{(j)}) &= 0 \\ \partial_t m_{ox}^{(j)} + \partial_{\mathbf{x}}.(m_{ox}^{(j)}\mathbf{u}^{(j)}) &= 0 \\ \partial_t m_{al}^{(j)} + \partial_{\mathbf{x}}.(m_{al}^{(j)}\mathbf{u}^{(j)}) &= -M_{al\to g}^{(j)} \\ \partial_t(m^{(j)}\mathbf{u}^{(j)}) + \partial_{\mathbf{x}}.(m^{(j)}\mathbf{u}^{(j)}\otimes\mathbf{u}^{(j)}) &= \mathbf{F}^{(j)} - M_{al\to g}^{(j)}\mathbf{u}^{(j)} \\ \partial_t(m^{(j)}e^{(j)}) + \partial_{\mathbf{x}}.(m^{(j)}e^{(j)}\mathbf{u}^{(j)}) &= \mathrm{H}^{(j)} - M_{al\to g}^{(j)}e^{(j)}\end{cases} \tag{6.47}$$

Ce système met en lumière la flexibilité du modèle simplifié si ce dernier est utilisé sans prise en compte des transferts de masse pour l'espèce alumine. Les équations ont une forme proche de celles utilisées pour la méthode Multi-Classe car les flux entre sections n'apparaissent plus. Les termes sources d'échange avec le gaz doivent cependant être intégrés sur les sections et l'étape d'inversion est nécessaire quand la NDF subit des changements, suite à du transport dans l'espace physique par exemple.

#### 6.4.3.5 Système dégénéré pour le traitement des résidus d'alumine après combustion

Quand la phase de combustion est achevée, tout l'aluminium des gouttes s'est évaporé, le système prend la forme suivante :

$$\begin{cases} \partial_t n^{(j)} + \partial_{\mathbf{x}}.(n^{(j)}\mathbf{u}^{(j)}) & = \mathcal{B}_n^{(j)+} - \mathcal{B}_n^{(j)-} + \mathcal{C}_n^{(j)+} - \mathcal{C}_n^{(j)-} \\ \partial_t m_{ox}^{(j)} + \partial_{\mathbf{x}}.(m_{ox}^{(j)}\mathbf{u}^{(j)}) & = \mathcal{B}_{m_{ox}}^{(j)+} - \mathcal{B}_{m_{ox}}^{(j)-} + \mathcal{C}_{m_{ox}}^{(j)+} - \mathcal{C}_{m_{ox}}^{(j)-} \\ \partial_t (m^{(j)}\mathbf{u}^{(\mathbf{j})}) + \partial_{\mathbf{x}}.(m^{(j)}\mathbf{u}^{(j)} \otimes \mathbf{u}^{(j)}) & = \mathbf{F}^{(j)} + \mathcal{B}_u^{(j)+} - \mathcal{B}_u^{(j)-} + \mathcal{C}_u^{(j)+} - \mathcal{C}_u^{(j)-} \\ \partial_t (m^{(j)}e^{(j)}) + \partial_{\mathbf{x}}.(m^{(j)}e^{(j)}\mathbf{u}^{(j)}) & = \mathrm{H}^{(j)} + \mathcal{B}_e^{(j)+} - \mathcal{B}_e^{(j)-} + \mathcal{C}_e^{(j)+} - \mathcal{C}_e^{(j)-} \end{cases} \tag{6.48}$$

où $\mathcal{B}_\phi^{(j)-}$ et $\mathcal{B}_\phi^{(j)+}$ sont respectivement des termes sources de disparition ou de création pour la grandeur $\phi$ et pour la section $j$ suite à de la fragmentation secondaire. Les termes $\mathcal{C}_\phi^{(j)-}$ et $\mathcal{C}_\phi^{(j)+}$ sont respectivement des termes sources de disparition ou de création pour la grandeur $\phi$ et pour la section $j$ suite à de la coalescence. Plus de détails sur le développement des méthodes MF et des schémas d'intégration de ces termes sont fournis dans [Doisneau, 2013].
Dans le système ci-dessus, l'équation de conservation sur la concentration massique d'aluminium a été retirée car l'espèce n'existe plus, on a : $m^{(j)} = m_{ox}^{(j)}$. Le système revient à une méthode MF pour l'étude de gouttes monocomposants à la différence que les moments utilisés sont d'ordre 0 et 1. Pour une étude moteur complète, c'est-à-dire un calcul combinant la phase de combustion de gouttes bicomposants et celle des résidus d'alumine pouvant coalescer ou se fragmenter, le modèle MF simplifié semble particulièrement approprié. Le point clé est le passage de la résolution de l'Eq.(6.41) (avec condensation d'alumine) ou de l'Eq.(6.47) (sans condensation d'alumine) à celle de l'Eq.(6.48) où $m_{al}^{(j)} = 0,\ \forall j \in 1,..,\mathrm{N_{sec}}$. Les termes sources sur les échanges de masse et ceux liés à la coalescence ou/et à la fragmentation ne sont pas traités simultanément car nous faisons l'hypothèse qu'il n'y a pas d'interactions entre les gouttes au cours de la combustion. D'une part, ce type d'interactions n'a pas été, à ce jour, observé en conditions réelles. D'autre part, il y a peu de croisements de gouttes dans la zone de combustion et le dégagement de masse à la surface tend à les écarter.

## Conclusion du chapitre 6

Dans un premier temps, nous avons exposé la pertinence d'un conditionnement de la dynamique de la phase dispersée réactive par les masses d'aluminium et d'alumine. Puis, nous avons dérivé une méthode MF bicomposant en détaillant toutes les étapes de dérivation à partir de l'équation cinétique. Aussi, nous avons souligné l'efficacité de l'emploi des moments d'ordre 0 et 1 qui assurent un calcul analytique des coefficients de la reconstruction sur les sections 2D définies sur l'espace des masses. Cette méthode présente un formalisme particulièrement adapté pour suivre l'évolution de la composition massique de la goutte. Une première validation de cette nouvelle approche est proposée dans §8.3.3 où un schéma dédié aux transferts de masse est développé. Une seconde étude est menée dans §9.2.2 dans le contexte de l'acoustique diphasique linéaire. Finalement, nous proposons également deux autres méthodes : la première décrit la bicomposition du spray via un formalisme proche de la méthode Multi-Classe et la seconde approche constitue une simplification de la méthode MF bicomposant via un conditionnement de la masse d'aluminium par la masse d'alumine, approche justifiée en propulsion solide. Cette hypothèse conduit notamment à une réduction de la dimension de l'espace des masses à une seule dimension ce qui réduit significativement le temps calcul et simplifie le calcul des termes sources. Cette méthode est particulièrement adaptée à une simulation avancée des phénomènes de changements de taille rencontrés au sein d'un MPS considérant à la fois la combustion, le grossissement du lobe ainsi que la coalescence et la fragmentation des résidus. Ce modèle apparaît donc comme une alternative intéressante qui reste toutefois à valider dans le contexte de futurs calculs diphasiques et de travaux portant sur la combustion des gouttes d'$Al/Al_2O_3$.
Dans la partie suivante, nos efforts portent sur le développement de stratégies numériques dédiées au couplage fort entre les phases ainsi que sur la dérivation de schémas dédiés aux transferts de masse dans le contexte des modèles d'évaporation et de combustion avancées. Un ensemble de vérifications numériques est aussi proposé.

Troisième partie

# Stratégies numériques pour les calculs instationnaires diphasiques réactifs en couplage fort

# Chapitre 7

# Méthodes numériques dédiées aux solveurs diphasiques eulériens

*Nous avons travaillé dans la partie II sur la modélisation mathématique des méthodes eulériennes dédiées à l'amélioration de la description des sprays polydisperses réactifs fortement couplés à une phase gazeuse instationnaire. Le choix de la méthode d'intégration, et donc de couplage, est crucial et nécessite d'être adapté aussi bien aux contraintes spécifiques soulevées par des simulations diphasiques instationnaires qu'aux contraintes de simulations dans un contexte industriel. Nous cherchons à répondre aux exigences suivantes : 1- une intégration robuste du système couplé en respect des différents temps caractérisant les écoulements diphasiques 2- le traitement des singularités et des zones de vide 3- un ratio coût/précision intéressant et contrôlable pour des configurations complexes 4- une implémentation aisée et la possibilité de procéder à des modifications rapides. La première partie de ce chapitre illustre la pertinence d'une stratégie de séparation d'opérateurs, aussi appelée operator splitting en anglais. Nous présentons alors la décomposition du système couplé écrit dans le formalisme du modèle TSM-MF en sous-systèmes pour le transport spatial des deux phases et la résolution de leurs échanges. Après avoir justifié notre stratégie d'intégration temporelle, nous nous intéressons dans la seconde partie de ce chapitre à la résolution spatiale des opérateurs de transport. L'objectif est de réaliser une synthèse de schémas dédiés aux écoulements diphasiques à phase dispersée et décrits de manière eulérienne. Le développement de ces schémas représente un travail conséquent qui doit répondre simultanément aux traitements des singularités, des zones de vide ainsi qu'aux problèmes de diffusion numérique inhérente à une résolution eulérienne. Finalement, nous concluons sur les schémas actuels les plus appropriés pour les codes CFD industriels et les maillages non structurés généraux.*

## 7.1 Développement d'une stratégie de splitting d'opérateurs pour les problèmes diphasiques instationnaires

Le couplage entre l'acoustique de la chambre, les structures hydrodynamiques et la phase dispersée est difficile à restituer. L'impact des gouttes sur la dynamique de la phase gazeuse (cf. §5.2) est sensible à de très nombreux paramètres dont la taille, la concentration massique... Les écoulements en propulsion solide sont caractérisés par leur nature multi-échelle temporelle et la complexité du couplage entre les deux phases. Le système couplé donné dans l'Eq.(5.17) et choisi pour modéliser ces écoulements diphasiques présente une raideur mathématique particulièrement forte, ce qui peut amener à utiliser des pas de temps très petits que ce soit pour des raisons de stabilité (pour les schémas explicites) ou de précision. Pour illustrer cette contrainte, le paragraphe §7.1.1 suivant illustre les temps caractéristiques rencontrés dans les MPS.
Dans l'optique de réaliser des simulations avec un coût calcul abordable, il faut se fixer une limite raisonnable sur le pas de temps utilisé, limite basée sur les phénomènes physiques que l'on souhaite restituer. On souhaite pouvoir le piloter tout en satisfaisant les trois critères suivants :
- Assurer la stabilité et la robustesse numérique de la résolution du système étudié.
- Garantir la précision des interactions visées en propulsion notamment celle du couplage spray-acoustique.
- S'inscrire au sein d'une méthode d'intégration pertinente facilement implémentable et modifiable dans un code à vocation industrielle.

### 7.1.1 Hiérarchie des échelles de temps rencontrées dans les MPS et objectifs pour les futurs calculs industriels

Quatre temps principaux sont recensés pour les écoulements diphasiques réactifs :

1. Le temps caractéristique de la phase gazeuse $\tau_g = min(\tau_g^c, \tau^{acou})$ qui est soit piloté par l'acoustique quand l'écoulement est subsonique comme c'est le cas dans la chambre d'un MPS, soit contrôlé par la convection quand le régime supersonique est atteint, par exemple dans la tuyère.

2. Le temps de convection pour la phase dispersée $\tau_p^c$.

3. Le temps de relaxation des gouttes $\tau_{min} = min(\tau_u, \tau_T)$.

4. Le temps d'évaporation des gouttes $\tau_m$.

Les instabilités de fonctionnement résultant d'un couplage entre l'hydrodynamique et l'acoustique, nous cherchons de préférence à résoudre les échelles de temps liées à la phase gazeuse. Les maillages en propulsion solide sont habituellement construits de manière à avoir une limite raisonnable pour le pas de temps lorsque l'on réalise une intégration explicite des équations du gaz. En effet, il est privilégié des schémas d'intégration explicite pour ne pas dégrader l'acoustique ; le critère CFL donné en Eq.(7.16) doit au moins être inférieur à 1 pour que l'approche explicite soit possible. Les pas de temps conduisant à ces valeurs de CFL sont classiquement $\tau_g^c \approx 10^{-6}$s pour les maillages des MPS. Le temps $\tau_p^c$ est souvent d'un ordre de grandeur supérieur à celui de la phase gazeuse.

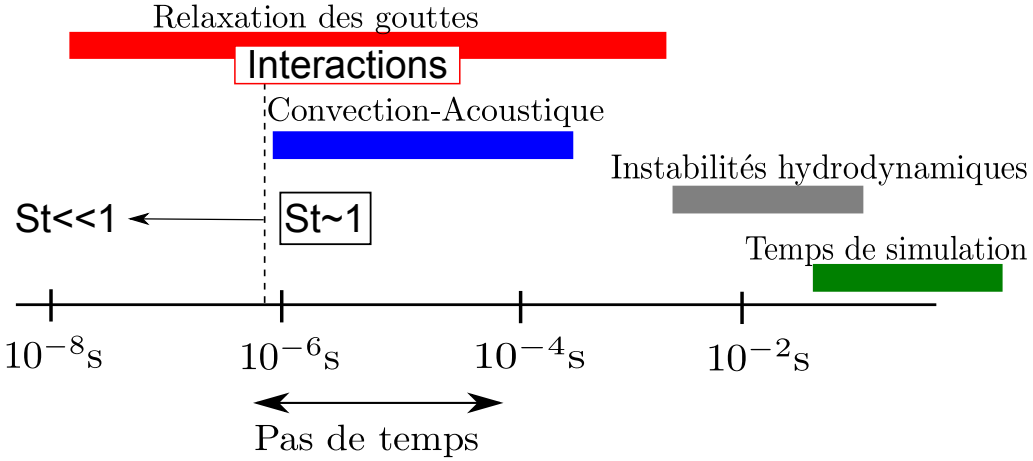


**FIGURE 7.1** – *Hiérarchie des échelles de temps dans la simulation diphasique des instabilités de fonctionnement des longs MPS*

Pour la granulométrie des gouttes d'aluminium employée dans les MPS (de 1$\mu$m à 100$\mu$m), les temps de combustion sont typiquement compris entre $10^{-5}$s et $10^{-1}$s. Les échelles de temps pour les relaxations dynamique et thermique couvrent également un spectre assez large ce qui renforce la raideur du problème. Si les tailles de gouttes initiales correspondent à des temps caractéristiques de l'ordre de $10^{-4}$s, ils sont inférieurs à $10^{-6}$s pour des résidus microniques voire nanométriques. Comme illustré dans la Fig.(7.1), les échelles temporelles les plus restrictives sont introduites par les plus petites gouttes de la phase dispersée. Dans le cadre de cette thèse, on classifie les gouttes en deux catégories :

– Les grosses gouttes pour $\tau_{min} > \tau_g$

– Les petites gouttes pour $\tau_{min} < \tau_g$

Prendre en compte le spectre complet des temps caractéristiques n'est pas envisageable dans une approche industrielle. On cherche à fixer le pas de temps tel que $\Delta t \approx \tau_g$ afin d'assurer une bonne résolution de l'acoustique. Ce faisant l'interaction entre le gaz et les petites gouttes n'est pas parfaitement restituée. Ces gouttes, obtenues en fin de combustion comme présenté dans §3.1.2.5,

se comportent comme des traceurs car St << 1 ; elles n'ont pas d'impact majeur sur l'acoustique de la chambre sauf dans le cas d'un taux de chargement important. De plus, elles jouent un rôle très faible sur la structure globale de l'écoulement car elles représentent une concentration massique peu élevée. En pilotant le pas de temps par rapport à $\tau_g$, nous verrons que les interactions entre l'acoustique et les gouttes sont globalement très bien restituées. Pour s'en assurer, des études sont proposées dans §9.2 et §12.1.2 afin de mettre en évidence l'influence du pas de temps sur la solution numérique.

### 7.1.2 Pertinence d'une méthode de splitting pour l'intégration en temps du système diphasique

Une stratégie d'intégration phase par phase est envisageable (c'est la cas pour la version 4.1 du code CEDRE cf. chapitre 10) : les systèmes gaz et liquide sont intégrés séparément et les termes sources sont réévalués à chaque phase d'intégration en supposant que la phase non traitée est figée. Nous avons montré que cette méthode n'est pas robuste [Doisneau et al., 2014] pour des problèmes raides et quand la concentration massique des gouttes est importante, ce qui implique une forte rétroaction sur le gaz comme expliqué dans §3.1.2.3. Dans l'exemple donné en Fig.(7.2), on met en évidence sur une résolution 0D la relaxation des vitesses gaz et liquide vers une valeur d'équilibre avec une intégration alternée des variables, l'une évoluant au cours d'un pas de temps pendant que l'autre est fixe. Cette situation conduit à une oscillation marquée des valeurs autour de l'équilibre quand le pas d'intégration est grand. Sur ce cas 0D, la solution finit par converger. Dans un cas multi-dimensionnel avec convection, des valeurs non convergées sont alors transportées dans le domaine étudié. On comprend donc que la précision de la solution soit significativement dégradée, voire que des problèmes de robustesse apparaissent.

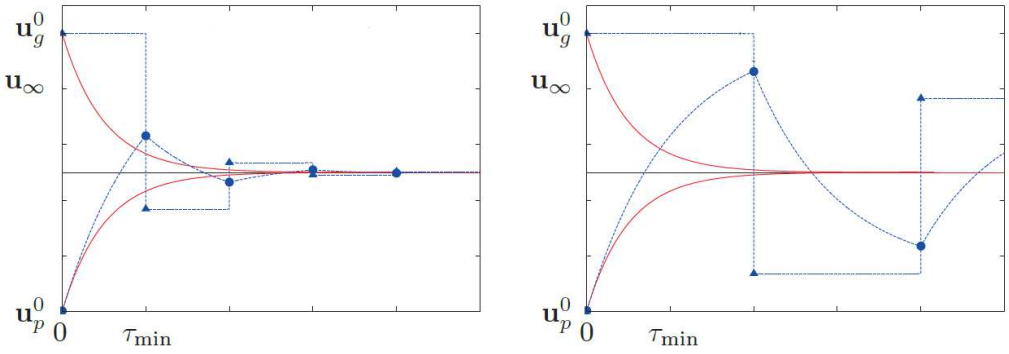


**Figure 7.2** – *Relaxation 0D des vitesses du gaz et d'un spray monodisperse vers une valeur d'équilibre, cas d'un rapport massique égal à 1 entre les deux phases. A gauche, calcul de l'évolution des variables avec un pas de temps égal à $\tau_{min}$ et à droite avec un pas de temps deux fois plus grand*

Une autre stratégie numérique basée sur des méthodes IMEX (acronyme pour IMplicite-EXplicite) [Crouzeix, 1980; Shampine et al., 2006], qui associent des schémas explicites et implicites adaptés aux problèmes raides, peut être envisagée. Néanmoins, le développement d'une telle méthode est fortement lié au cadre mathématique fixé par les équations pilotant le problème. Dès que le cadre d'étude est changé, il est nécessaire de revoir l'ensemble de la stratégie et de l'implémentation. Afin de répondre aux besoins inhérents à la construction d'un solveur diphasique à vocation industrielle, la flexibilité de l'implémentation d'une méthode de couplage est un paramètre clé ; la stratégie IMEX ne répond pas à ce besoin.

Une alternative intéressante repose sur une méthode de séparation d'opérateurs qui semble particulièrement adaptée pour des codes industriels dont l'objectif est d'optimiser le ratio coût/précision. Cette stratégie d'intégration en temps consiste à découpler le problème global en sous-systèmes physiques correspondant à des opérateurs qui sont intégrés successivement. Elle se prête plus précisément aux problèmes instationnaires.
La technique d'intégration par splitting a de nombreux avantages ; le principal est d'avoir la possibilité de résoudre chaque sous-système avec la méthode numérique dédiée et d'utiliser un pas de temps interne en fonction des échelles de temps caractéristiques du sous-problèmes pour répondre soit à des critères de robustesse soit à un besoin de précision. Il est donc possible de choisir un pas de temps global, appelé pas de temps de splitting, qui n'est pas contraint par des critères

de stabilité des méthodes numériques utilisées pour les différents opérateurs [Duarte et al., 2011; Duarte et al., 2013]. Pour nos applications, nous fixons le pas de temps de splitting par rapport au temps acoustique. De plus, les plus petites gouttes caractérisées par des temps caractéristiques très rapides présentent des nombres de Stokes très faibles. Elles n'impactent donc pas significativement la phase gazeuse ce qui justifie de fixer comme limite raisonnable à notre pas de temps le temps de propagation acoustique dans le gaz.

Deux sources d'erreurs numériques sont à recenser pour les méthodes de splitting :
- La première est l'erreur dite de splitting ; elle est introduite par le découplage temporel et l'intégration indépendante de sous-systèmes qui doivent normalement évoluer ensemble. Cette erreur a notamment été étudiée dans [Hundsdorfer and Verwer, 2003; Duarte, 2011] pour des problèmes monophasiques d'advection/réaction/diffusion. Elle apparaît également dans le cadre d'étude des écoulements diphasiques mettant en jeu différents systèmes d'équations de conservation couplés uniquement par des termes sources. Ainsi, il est nécessaire d'intégrer ces derniers au sein d'un même opérateur et d'utiliser une méthode numérique dédiée afin de garantir le régime asymptotique local de ce sous problème. En effet, les variables du gaz et de la phase dispersée relaxent entres elles à des vitesses d'équilibre pilotées par les temps caractéristiques propres à chaque taille de gouttes.

- Le second type d'erreurs découle à la fois des stratégies de discrétisations temporelle et spatiale et des méthodes numériques utilisées pour l'intégration des sous-problèmes. Il s'agit par exemple d'un pas de temps mal choisi qui conduit à un CFL trop bas, et donc à de la diffusion numérique.

Pour la simulation d'écoulements diphasiques, la méthode de splitting a été étudiée pour les sprays avec prise en compte de la coalescence [Doisneau et al., 2013; Doisneau, 2013]. Dans le cadre de cette thèse, nous la validons en deux temps pour les particules inertes [Doisneau et al., 2014] puis pour les transferts de masse [Sibra et al., 2014] avec différents modèles d'évaporation et de combustion. On cherche en particulier à ce que la méthode soit robuste pour toutes les échelles de temps rencontrées dans les MPS (cf. §7.1.1) et qu'elle soit suffisamment précise pour restituer avec fidélité les interactions gaz/particules. Son développement est donc basé sur l'identification et l'analyse des difficultés numériques spécifiques aux différents problèmes physiques. Dans le cas des sprays évaporants, la polydispersion évolue constamment et les échelles temporelles du problème changent significativement.
En outre, les échanges entre phases présentent souvent des spectres de temps caractéristiques très étendus comme rappelé dans §3.1.2.5 et §7.1.1. D'un point de vue numérique, les problèmes étudiés sont donc raides ce qui nécessite d'utiliser des méthodes numériques précises et robustes, par exemple des schémas implicites et d'ordre élevé pour l'integration des termes sources dans le cadre des particules inertes [Hairer and Wanner, 1996]. Dans cette thèse, nous nous intéressons plus particulièrement au développement de méthodes numériques dédiées aux termes sources réactifs dans le contexte des méthodes TSM-MF. Ce point fait l'objet d'un travail d'analyse et de validations numériques dans le chapitre 8.
Les stratégies de splitting sont également intéressantes pour atteindre un rapport coût/précision acceptable. En effet, tant que la stabilité numérique est assurée dans chacun des sous-problèmes, la stabilité globale de la méthode est assurée pour les méthodes de splitting utilisées par la suite.
Le choix du pas de temps global de splitting et des pas de temps internes à chaque opérateur est donc une étape importante. L'avantage des méthodes de splitting à utiliser un pas de temps de couplage relativement grand peut se révéler au final un inconvénient. En effet, l'erreur de splitting devient significative lorsque le pas de temps est plus grand que les échelles de temps de couplage physique. Les stratégies d'intégration par splitting introduisent automatiquement une erreur de découplage mais cette dernière est acceptable si le pas de temps est inférieur ou proche du plus petit temps caractéristique d'interaction du système couplé.
D'une manière générale, les erreurs numériques introduites lors de la résolution de chaque sous-système sont loin d'être négligeables. Nous ne voulons pas qu'elles soient du même ordre de grandeur que l'erreur de splitting. En employant des méthodes numériques précises au sein de chaque opérateur i.e. avec des ordres en temps élevés, l'erreur globale de la solution résulte principalement de la résolution découplée des systèmes splittés. L'ordre en temps du système couplé dépend donc du choix de la méthode de splitting.
De nombreuses méthodes de splitting existent telles que le schéma de Lie d'ordre un en temps [Trotter, 1959] et de Strang qui est d'ordre deux [Strang, 1968]. La première méthode est basée sur une intégration à un pas au cours de laquelle les sous-problèmes sont successivement résolus avec le même pas de temps de splitting. Le formalisme de Strang revient à réaliser une composition

symétrique d'intégration à un pas en utilisant un demi pas de temps pour les sous-systèmes. Des stratégies de splitting d'opérateurs d'ordre élevé ont été développées [Schatzman, 2002; Thalhammer, 2008; Castella et al., 2009; Hansen and Ostermann, 2009] mais elles impliquent des développements numériques conséquents et elles sont particulièrement difficiles à implémenter dans des codes industriels. Rappelons qu'un des objectifs est d'utiliser des schémas numériques robustes et précis au sein de chaque opérateur. L'ordre en temps de ces derniers doit rester égal ou supérieur à celui de la méthode de splitting car l'ordre en temps global est piloté par le schéma d'ordre temporel le plus bas. On privilégie alors les méthodes de splitting de Lie ou de Strang et des schémas d'intégration d'ordre plus élevé pour la résolution des sous-systèmes.

### 7.1.3 Décomposition en sous-systèmes

Nous choisissons de découpler le transport pour le gaz et les gouttes du couplage entre les deux phases. Partant du système donné par (5.17), nous séparons les opérateurs pour la convection $\mathcal{T}_g$, $\mathcal{T}_k$ de celui pour le traitement des termes sources $\mathcal{S}$. Ces opérateurs s'appliquent sur le vecteur $\mathrm{Q}(t,x) \in \mathbb{R}^{\mathrm{N_{sec}}(n_d+3)+\mathrm{N_{spec}}+n_d+1}$ où nous rappelons que $n_d$ est la dimension de l'espace physique. Nous l'écrivons :
$\mathrm{Q}(t,.) = [\rho_g, \rho_g \mathrm{Y}_1, ..., \rho_g \mathrm{Y}_{\mathrm{N_{spec}}-1}, \rho_g \mathbf{u_g}, \rho_g E_g, (n^{(k)}, m^{(k)}, m^{(k)}\mathbf{u^{(k)}}, m^{(k)}h^{(k)})_{k=1,\mathrm{N_{sec}}}]^t(t,.)$
Le semi-groupe pour le transport gaz $\mathcal{T}_g$ assure la convection ainsi que la propagation des ondes acoustiques :

$$\mathcal{T}_g \begin{cases} \partial_t\left(\rho_g \mathrm{Y_i}\right) + \partial_{\mathbf{x}}.(\rho_g \mathrm{Y_i}\mathbf{u_g}) = 0 \qquad i = 1, \mathrm{N_{spec}} - 1 \\ \partial_t \rho_g + \partial_{\mathbf{x}}.(\rho_g \mathbf{u_g}) = 0 \\ \partial_t\left(\rho_g \mathbf{u_g}\right) + \partial_{\mathbf{x}}.\left(\rho_g \mathbf{u_g} \otimes \mathbf{u_g} + p\right) = 0 \\ \partial_t\left(\rho_g E_g\right) + \partial_{\mathbf{x}}.\left(\left(\rho_g E_g + p\right)\mathbf{u_g}\right) = 0 \end{cases} \tag{7.1}$$

Notons que $\mathcal{T}_g^{\Delta t}\mathrm{Q}_0$ est la solution pour un pas de temps $\Delta t$ à partir de la condition initiale $\mathrm{Q}(0,.) = \mathrm{Q}_0$ ; les variables de la phase liquide sont inchangées. Comme présenté dans (5.17), les équations d'Euler sont choisies pour la description du gaz. Néanmoins, la généralisation aux équations de Navier-Stokes pour prendre en compte les effets visqueux ne pose pas de problème. La possibilité de découpler à nouveau avec un splitting d'opérateurs réaction/diffusion/convection a été présentée et validée dans [Duarte et al., 2011; Duarte, 2011]. Dans le cadre des simulations de propulsion solide, les nombres de Reynolds sont particulièrement élevés et les maillages peu raffinés dans les couches limites. Les échelles de temps pour la diffusion sont généralement moins rapides que celles pour la convection ; intégrer le terme visqueux au sein de l'opérateur de transport est possible d'autant plus que des méthodes numériques adaptées existent.
La convection de la phase liquide s'effectue de façon indépendante pour chacune des sections, nous avons $\mathrm{N_{sec}}$ opérateurs de transport qui s'écrivent pour l'approche monocomposant :

$$\mathcal{T}_k \begin{cases} \partial_t n^{(k)} + \partial_{\mathbf{x}}.\left(n^{(k)}\mathbf{u^{(k)}}\right) = 0 \\ \partial_t m^{(k)} + \partial_{\mathbf{x}}.\left(m^{(k)}\mathbf{u^{(k)}}\right) = 0 \\ \partial_t\left(m^{(k)}\mathbf{u^{(k)}}\right) + \partial_{\mathbf{x}}.\left(m^{(k)}\mathbf{u^{(k)}} \otimes \mathbf{u^{(k)}}\right) = 0 \\ \partial_t\left(m^{(k)}h^{(k)}\right) + \partial_{\mathbf{x}}.\left(m^{(k)}h^{(k)}\mathbf{u^{(k)}}\right) = 0 \end{cases} \tag{7.2}$$

Notons que $\mathcal{T}_k^{\Delta t}\mathrm{Q}_0$ est la solution pour un pas de temps $\Delta t$ à partir de la condition initiale $\mathrm{Q}_0$ ; les variables de la phase gazeuse et des autres sections sont inchangées. Tous les opérateurs pour les systèmes "fluides" que ce soit pour le gaz ou les différentes sections évoluent à leur propre vitesse et ne présentent aucun couplage. Ainsi, un ensemble de critères de stabilité CFL peut être déterminé. En choisissant un pas de temps de splitting grand, il est possible d'optimiser au sein de chaque opérateur un pas de temps interne assurant la stabilité numérique. Un gain en temps de calcul est alors obtenu car les contraintes de stabilité inhérentes au traitement d'un problème physique n'impactent pas l'ensemble de la résolution et le choix du pas de temps global pour l'intégration. La méthode contribue à améliorer le ratio coût/précision.
Le sous-système pour les termes sources $\mathcal{S}$ assure le couplage entre les deux phases au travers des

échanges de masse, de quantité de mouvement et d'énergie :

$$\mathcal{S}\left\{\begin{array}{l}
\partial_t \rho_g = \sum_{k=1}^{\mathrm{N_{sec}}} \mathrm{M}^{(k)} \\
\partial_t \left(\rho_g \mathrm{Y_i}\right) = 0, \qquad i = 1, \mathrm{N_{spec}} - 1 \\
\partial_t \left(\rho_g \mathbf{u_g}\right) = -\sum_{k=1}^{\mathrm{N_{sec}}} \left(\mathbf{F^{(k)}} - \mathrm{M}^{(k)} \mathbf{u^{(k)}}\right) \\
\partial_t \left(\rho_g E_g\right) + \partial_{\mathbf{x}}.\left(\left(\rho_g E_g + p\right) \mathbf{u_g}\right) = -\sum_{k=1}^{\mathrm{N_{sec}}} \left(\left(\mathrm{H}^{(k)} + \mathbf{F^{(k)}}.\mathbf{u^{(k)}}\right)\right. \\
\qquad\qquad \left. -\mathrm{M}^{(k)} \left(h^{(k)} + L_v^{(k)} + \frac{1}{2}\|\mathbf{u^{(k)}}\|^2\right)\right) \\
\left.\begin{array}{lll}
\partial_t n^{(k)} & = \mathcal{N}^{(k+1)} - \mathcal{N}^{(k)} & \\
\partial_t m^{(k)} & = \left(\mathcal{E}^{(k+1)} - \mathcal{E}^{(k)}\right) & - \mathrm{M}^{(k)} \\
\partial_t (m^{(k)} \mathbf{u^{(k)}}) & = \left(\mathcal{E}^{(k+1)} \mathbf{u^{(k+1)}} - \mathcal{E}^{k} \mathbf{u^{(k)}}\right) & - \mathrm{M}^{(k)} \mathbf{u^{(k)}} + \mathbf{F^{(k)}} \\
\partial_t (m^{(k)} h^{(k)}) & = \left(\mathcal{E}^{(k+1)} h^{(k+1)} - \mathcal{E}^{(k)} h^{(k)}\right) & - \mathrm{M}^{(k)} h^{(k)} + \mathrm{H}^{(k)}
\end{array}\right\} k = 1, \mathrm{N_{sec}}
\end{array}\right. \tag{7.3}$$

Notons que $\mathcal{S}^{\Delta t} \mathrm{Q}_0$ est la solution pour un pas de temps $\Delta t$ à partir de la condition initiale $\mathrm{Q}_0$. Cet opérateur représente une collection de systèmes d'EDO pour l'ensemble des variables du gaz et du liquide paramétré par la position d'espace $\mathbf{x}$. Pour chaque système, ces variables relaxent vers un état d'équilibre à une vitesse fonction des temps de relaxation des gouttes. Il est à noter que les termes sources de couplage s'appliquant au gaz correspondent à la somme des termes sources intra-sectionnels de toutes les sections. La conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie est alors assurée. En fonction de la polydispersion, la nature multi-échelle temporelle du système diphasique peut être importante ce qui mène à des problèmes de raideur. De plus, cela est contraignant dans le cas de petites gouttes avec des temps de relaxation très courts. Dans le cadre des sprays évaporants, cette situation est rencontrée et doit faire l'objet d'un traitement numérique spécifique pour assurer une précision suffisante de toutes les interactions. Pour la méthode MF, la résolution des termes d'échanges entre sections doit également faire l'objet de développements dédiés. En effet, il s'agit de résoudre : 1- un problème de transport dans l'espace des tailles avec pour contrainte le respect des conditions de réalisabilité inhérente aux méthodes MF (cf. §5.1) 2- un calcul des termes intra-sectionnels pour le couplage avec le gaz.

#### 7.1.3.1 Formalisme pour le cas bicomposant

Dans le cas de la méthode bicomposant développée dans §6.2, l'écriture des opérateurs de la phase dispersée est adaptée à l'étude d'un espace des phases à deux dimensions pour l'étude de la composition massique. Ainsi, la convection de la phase liquide s'effectue de façon indépendante pour $\mathrm{N_{al}} \times \mathrm{N_{ox}}$ opérateurs de transports noté $\mathcal{T}_{k,j}$ :

$$\mathcal{T}_{k,j}\left\{\begin{array}{l}
\partial_t n^{(k,j)} + \partial_{\mathbf{x}}.\left(n^{(k,j)} \mathbf{u^{(k,j)}}\right) = 0 \\
\partial_t m_{al}^{(k,j)} + \partial_{\mathbf{x}}.\left(m_{al}^{(k,j)} \mathbf{u^{(k,j)}}\right) = 0 \\
\partial_t m_{ox}^{(k,j)} + \partial_{\mathbf{x}}.\left(m_{ox}^{(k,j)} \mathbf{u^{(k,j)}}\right) = 0 \\
\partial_t \left(m^{(k,j)} \mathbf{u^{(k,j)}}\right) + \partial_{\mathbf{x}}.\left(m^{(k,j)} \mathbf{u^{(k,j)}} \otimes \mathbf{u^{(k,j)}}\right) = 0 \\
\partial_t \left(m^{(k,j)} e^{(k,j)}\right) + \partial_{\mathbf{x}}.\left(m^{(k,j)} e^{(k,j)} \mathbf{u^{(k,j)}}\right) = 0
\end{array}\right. \tag{7.4}$$

L'opérateur des termes sources pour les interactions gaz/gouttes s'écrit sous la forme réduite sui-

vante :

$$\mathcal{S}\begin{cases} \partial_t(\rho_g) = \sum_{j=1}^{\mathrm{N_{ox}}}\sum_{k=1}^{\mathrm{N_{al}}} S^{mass}_{g\to(k,j)}, \qquad \partial_t(\rho_g \mathbf{u_g}) = \sum_{j=1}^{\mathrm{N_{ox}}}\sum_{k=1}^{\mathrm{N_{al}}} S^{mom}_{g\to(k,j)}, \qquad \partial_t(\rho_g E_g) = \sum_{j=1}^{\mathrm{N_{ox}}}\sum_{k=1}^{\mathrm{N_{al}}} S^{ener}_{g\to(k,j)} \\ \partial_t n^{(k,j)} = S^{nb}_{sec\to(k,j)} \\ \partial_t m_{al}^{(k,j)} = S^{m_{al}}_{g\to(k,j)} + S^{m_{al}}_{sec\to(k,j)}, \qquad \partial_t m_{ox}^{(k,j)} = S^{m_{ox}}_{g\to(k,j)} + S^{m_{ox}}_{sec\to(k,j)} \\ \partial_t\left(m^{(k,j)}\mathbf{u^{(k,j)}}\right) = S^{mom}_{sec\to(k,j)} + S^{mom}_{g\to(k,j)}, \qquad \partial_t\left(m^{(k,j)}e^{(k,j)}\right) = S^{ener}_{sec\to(k,j)} + S^{ener}_{g\to(k,j)} \end{cases} \tag{7.5}$$

Nous notons $S_{g\to(k,j)}$ les termes sources relatifs à un échange du gaz vers la section $(k,j)$ et $S_{sec\to(k,j)}$ les apports des sections adjacentes.

## 7.1.4 Intégration des opérateurs et ordres en temps

### 7.1.4.1 Splitting convection/sources

Le point clé dans le développement d'une méthode de splitting concerne l'ordre et la manière dont les différents opérateurs sont intégrés. Plusieurs stratégies sont envisageables et assurent différents ordres en temps : un splitting de Strang se caractérise par une convergence en temps d'ordre deux tant que la solution reste régulière. Le splitting de Lie correspond à un ordre un.
Pour chacune de ces stratégies, l'ordre d'intégration des opérateurs a un impact sur l'erreur de splitting. Il a été démontré dans [Descombes and Massot, 2004] que les opérateurs qui contenaient les échelles de temps les plus rapides devaient être intégrés en dernier. L'étude de sprays évaporants, et donc de très petites particules, montre que les temps de relaxation des gouttes sont les plus contraignants. Il est recommandé d'intégrer l'opérateur des termes de couplage en dernier, cela donne pour les splitting de Strang et de Lie le formalisme suivant :

$$\mathrm{Q}^{\mathrm{Strang}} = \mathcal{S}^{\Delta t/2}\ [\sum_{k=1}^{\mathrm{N_{sec}}}\mathcal{T}_k + \mathcal{T}_g]^{\Delta t}\ \mathcal{S}^{\Delta t/2}\ \mathrm{Q}_0 \tag{7.6}$$

$$\mathrm{Q}^{\mathrm{Lie}} = \mathcal{S}^{\Delta t}\ [\sum_{k=1}^{\mathrm{N_{sec}}}\mathcal{T}_k + \mathcal{T}_g]^{\Delta t}\ \mathrm{Q}_0 \tag{7.7}$$

Nous définissons $\mathrm{Q}^{\mathrm{Strang}}$ et $\mathrm{Q}^{\mathrm{Lie}}$ comme les solutions pour un pas de temps $\Delta t$ résultant de la résolution exacte de chaque sous-système successivement intégré à partir de la condition initiale.

**Ecriture pour le cas bicomposant**
Dans le cas de la méthode MF bicomposant, la stratégie de splitting s'écrit :

$$\mathrm{Q}^{\mathrm{Strang}} = \mathcal{S}^{\Delta t/2}\ [\sum_{j=1}^{\mathrm{N_{ox}}}\sum_{k=1}^{\mathrm{N_{al}}}\mathcal{T}_{k,j} + \mathcal{T}_g]^{\Delta t}\ \mathcal{S}^{\Delta t/2}\ \mathrm{Q}_0 \tag{7.8}$$

$$\mathrm{Q}^{\mathrm{Lie}} = \mathcal{S}^{\Delta t}\ [\sum_{j=1}^{\mathrm{N_{ox}}}\sum_{k=1}^{\mathrm{N_{al}}}\mathcal{T}_{k,j} + \mathcal{T}_g]^{\Delta t}\ \mathrm{Q}_0 \tag{7.9}$$

### 7.1.4.2 Splitting à deux étages : proposition d'un opérateur acoustique

Pour des problèmes présentant une grande variété d'échelles de temps, certains opérateurs n'ont pas besoin d'être appelés aussi souvent que les autres. De plus, l'utilisation de grands pas de temps pour la résolution des opérateurs peut contribuer à réduire la dissipation numérique des schémas. Le temps de calcul est aussi diminué. Dans cette optique, des méthodes de splitting à plusieurs

étages sont appropriées. Comme exemple, nous prenons celui de l'acoustique diphasique dans un milieu au repos présenté dans le chapitre 5.2 qui illustre des temps de convection pour les particules très lents devant les temps acoustiques et ceux relatifs aux interactions entre phases.
Nous proposons alors un splitting à deux étages où le transport des gouttes est effectué moins souvent que celui du gaz ou de l'intégration des termes sources de couplage. En choisissant un splitting de Lie pour l'étage supérieur, nous avons :

$$\mathrm{Q}^{\mathrm{Lie}} = \mathcal{A}^{\Delta t_c} \; [\sum_{k=1}^{\mathrm{N_{sec}}} \mathcal{T}_k]^{\Delta t_c} \; \mathrm{Q}_0 \tag{7.10}$$

Nous rappelons qu'à cette étape, les opérateurs se présentent sous leur forme exacte. Ce n'est qu'en choisissant une discrétisation spatiale et un schéma numérique que le pas de temps $\Delta t_c$ peut être déterminé en prenant en compte le temps de convection des gouttes le plus restrictif qui garantit les critères CFL liquides. Nous introduisons l'opérateur acoustique $\mathcal{A}$ traitant la résolution du transport de la phase gazeuse, de l'acoustique et des interactions diphasiques. L'opérateur acoustique est intégré en dernier pour l'étage supérieur du splitting car nous supposons qu'il contient les échelles de temps les plus rapides. Nous proposons un splitting de Strang pour permettre de capter précisément les interactions entre l'acoustique et le couplage entre phases :

$$\mathcal{A}(\Delta t_a) = \mathcal{S}^{\Delta t_a/2} \; \mathcal{T}_g^{\Delta t_a} \; \mathcal{S}^{\Delta t_a/2}, \qquad \mathcal{A}(\Delta t_c) = [\mathcal{A}(\Delta t_a)]^{\Delta t_c/\Delta t_a}, \; \Delta t_c/\Delta t_a \in \mathbb{N} \tag{7.11}$$

Comme expliqué précédemment, le pas de temps de l'étage inférieur $\Delta t_a$ est déterminé en fonction des schémas numériques utilisés et des échelles de temps caractéristiques.
**N.B**. Des méthodes spécifiques sont nécessaires pour traiter des configurations où apparaissent des singularités telles que des chocs. Les méthodes de splitting sont encore envisageables. Néanmoins, comme expliqué dans [Billet et al., 2008], la stratégie de splitting d'opérateurs implique d'utiliser des pas de temps inférieurs aux échelles les plus rapides du problème. Dans le cadre de nos études, nous ne nous intéressons pas à ces régimes de fonctionnement mais uniquement au cas des tuyères adaptées et des écoulements sans discontinuités pour la phase gazeuse.

## 7.2 Méthodes numériques de résolution spatiale

Après avoir introduit la stratégie d'intégration en temps pour les systèmes couplés, on s'intéresse à la résolution des systèmes d'équations de conservation pour le transport de la phase gazeuse et de la phase liquide. On établit les critères de sélection des méthodes de résolutions spatiale et temporelle dans le contexte du développement des solveurs eulériens au sein de codes industriels.

### 7.2.1 Cahier des charges des méthodes numériques pour les codes CFD à vocation industrielle

La résolution des équations de la mécanique des fluides compressibles représente un domaine d'études particulièrement riche et en constante évolution. La recherche de la précision et de la robustesse de la solution via des méthodes de plus en plus évoluées sont des critères clés. Dans le contexte de ce travail, on réalise une synthèse des méthodes existantes et on souligne leurs avantages et leurs défauts pour identifier les plus adaptées aux codes de calcul à vocation industrielle.
En plus des objectifs de robustesse et de précision, la recherche de la simplicité d'implémentation et la maîtrise du coût calcul sont des contraintes importantes. La flexibilité des méthodes de résolution i.e. la possibilité de pouvoir les faire évoluer sans affecter significativement l'architecture du code est une exigence forte. Pour des applications industrielles, l'étude des écoulements au sein de géométries complexes mènent naturellement à utiliser des maillages non structurés tridimensionnels pour discrétiser le domaine d'étude. Pour ces maillages généraux composés d'éléments polyédriques quelconques (tétraèdres, octaèdres...), la topologie et la régularité des cellules sont deux contraintes à prendre en compte dans le développement de méthodes performantes. De plus, la possibilité de décomposer les maillages en sous-domaines afin de réaliser une parallélisation du calcul est un enjeu majeur des simulations actuelles ; une des problématiques posées est la communication entre les sous-domaines au niveau des cellules frontières.
Un point essentiel repose sur le choix de la stratégie de discrétisation spatiale et sur le respect de la nature des équations. L'approche volumes finis est une méthode à privilégier pour les systèmes de lois de conservation et consiste à approcher la valeur moyenne du champ au sein de volumes élémentaires appelés cellules. Les méthodes numériques basées sur cette approche doivent respecter une propriété de conservation locale au niveau discret. Les systèmes de lois de conservation hyperboliques ou faiblement hyperboliques génèrent des singularités en temps fini, quelle que soit la régularité de la solution initiale et une difficulté numérique notable porte sur le traitement de solutions présentant des discontinuités comme des ondes de chocs ou encore des discontinuités de contact. Les méthodes utilisées doivent pouvoir à la fois décrire avec précision ces discontinuités en reproduisant par exemple la dynamique d'une onde de choc mais aussi être suffisamment robuste pour éviter la divergence de la solution. Par ailleurs, le vecteur des variables conservatives vit dans un ouvert des états admissibles préservé par la dynamique au niveau continu et qui doit donc aussi être préservé par la solution discrète. Pour assurer la stabilité de la solution et la convergence vers la solution entropique, la plupart des schémas numériques que nous allons aborder ont été construits autour de trois règles : 1- préserver au niveau discret le caractère conservatif et la consistance avec le système de lois de conservation 2- vérifier un principe du maximum quand il existe au niveau continu 3- assurer la convergence vers la solution entropique par l'utilisation de schémas identifiés et stables. Le premier critère est satisfait par l'utilisation d'une méthode de volumes finis et flux numériques consistants. Les schémas que nous envisageons par la suite basés sur un solveur de Riemann exact ou approché et sur une reconstruction avec limiteur afin d'assurer un principe du maximum discret quand il est satisfait par le système de lois de conservation comme pour la vitesse dans la dynamique des gaz sans pression.
Avant le développement d'un schéma numérique, il est également nécessaire d'une part d'étudier la nature mathématique des équations à résoudre et d'autre part d'être conscient des phénomènes à traiter. La nature du système décrivant la phase gazeuse donné en Eq.(7.1) est hyperbolique, voire mixte hyperbolique-parabolique pour Navier-Stokes. En plus des zones de discontinuités pouvant être générées par ce type de systèmes, un des objectifs est de pouvoir restituer la propagation des ondes acoustiques. Pour nos applications, l'étude de l'acoustique est cruciale. On souhaite que le schéma numérique minimise deux phénomènes numériques : la dispersion (vitesse de propagation devenant dépendante de la fréquence) et la dissipation (diminution de l'amplitude). La précision des méthodes est donc importante, on s'intéresse donc aux développements de schémas d'ordre élevé en temps et en espace. Bien que cela ne soit pas notre objectif, la simulation de la turbulence nécessite des méthodes performantes qui limitent au maximum la dissipation numérique des structures hydrodynamiques que l'on souhaite suivre. Cette problématique est d'autant plus forte que la précision des schémas sur des maillages non structurés est plus difficile à atteindre.

Le système d'équations de conservation pour la phase dispersée présenté en Eq.(7.2) correspond à celui des gaz sans pression. Il est semblable à un système d'Euler compressible mais ne présente pas de terme de pression dans l'équation de quantité de mouvement. Le système a une nature faiblement hyperbolique et il n'existe qu'une seule valeur propre à la matrice Jacobienne des flux convectifs qui est la vitesse des particules. L'absence de terme de pression autorise la création de zones de vide et conduit à des accumulations locales non physiques de particules en temps fini appelées "$\delta$-shock". On retrouve la notion d'hypercompressibilité de la phase dispersée introduite dans §4.2. Par contre, ce système de lois de conservation satisfait un principe du maximum sur le champ de vitesse, y compris pour les solutions faibles. Les schémas à développer sont donc différents de ceux dédiés à la phase gazeuse. Il s'agit de garantir la stabilité de la méthode malgré ces zones de très fortes concentrations et une précision suffisamment élevée pour décrire et suivre les régions de forts gradients de densité au sein de l'écoulement. De plus, d'autres contraintes inhérentes aux systèmes MF doivent être respectées. Pour l'approche TSM-MF, le critère de réalisabilité sur le nombre et la masse introduit dans §5.1 doit être garanti. Pour les méthodes MF faisant appel à un nombre plus important de moments en taille, les critères de réalisabilité deviennent plus complexes à satisfaire comme cela est détaillé dans [Massot et al., 2010b; Kah, 2010; Kah et al., 2012; Emre, 2014] pour la méthode à quatre moments.

### 7.2.2 Résolution du transport de la phase gazeuse

Bien que nos simulations concernent des configurations multidimensionnelles, on introduit le principe général des différentes méthodes via une approche monodimensionnelle. Une discussion sur la pertinence de ces méthodes en 3D sur des maillages non structurés est proposée dans un second temps.
Les lois de conservation scalaires à une dimension d'espace se présentent sous la forme suivante :

$$\partial_t u(x,t) + \partial_x f(u(x,t)) = 0 \tag{7.12}$$

La variable conservative $u$ est assimilable à la masse volumique, à la quantité de mouvement ou encore à l'énergie. La fonction $f(u)$ représente la fonction de flux de l'équation de conservation. Si le flux de la loi de conservation est une fonction linéaire, l'équation de conservation est appelée équation d'advection linéaire ou équation d'onde. Une équation classique avec un flux convexe est l'équation de Bürgers [Bürgers, 1948], $f(u) = u^2/2$, introduite dans le contexte des écoulements turbulents sur une variable de type vitesse et qui préfigure le comportement des champs vraiment non linéaires des équations d'Euler de la dynamique des gaz compressibles.
Néanmoins, la résolution de la dynamique des gaz compressibles implique classiquement des systèmes d'équations de conservation non linéaires :

$$\begin{cases} \partial_t U + \partial_x (F(U)) = 0 \\ \\ U : \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}^m ; U(0,x) = U^0(x) \end{cases} \tag{7.13}$$

On se propose ici de faire une synthèse des différentes méthodes numériques couramment employées dans la résolution de la dynamique des gaz. Pour une étude plus approfondie des méthodes numériques appliquées aux systèmes non linéaires, il est possible de se référer à [LeVeque, 1992; LeVeque, 2004; Despres and Dubois, 2005; Toro, 2009].

#### 7.2.2.1 La discrétisation spatiale par une méthode de Volumes Finies

Les méthodes de discrétisation spatiale se divisent en trois catégories : éléments finis, différences finies et volumes finis. Dans le cadre d'étude de la dynamique des fluides, nous choisissons la méthode des volumes finis où on cherche à approcher les valeurs moyennes des variables sur des cellules. Pour cela, on écrit des équations de type bilan sur les cellules, ce qui fait que ces schémas sont naturellement conservatifs.
Par exemple, en 1D, si on note $[x_{i-\frac{1}{2}}; x_{i+\frac{1}{2}}]$ les cellules, $x_i$ leurs centres et $\Delta x_i$ leurs tailles. Les valeurs moyennes considérées sont :

$$u_i^n \approx \frac{1}{\Delta x_i} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u(x,t^n)\,\mathrm{d}x \tag{7.14}$$

En effectuant une intégration de l'équation de conservation sur un rectangle de l'espace caractéristique, c'est-à-dire mêlant une intégration temporelle et spatiale, la forme générale pour la résolution

des équations à l'ordre un en temps est la suivante :

$$U_i^{n+1} = U_{i-1}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x_i}\left(F_{i-\frac{1}{2}}^n - F_{i+\frac{1}{2}}^n\right) \tag{7.15}$$

Les termes $F_{i-\frac{1}{2}}^n$ et $F_{i+\frac{1}{2}}^n$ sont respectivement les flux numériques aux interfaces gauche et droite de la cellule. C'est sur la méthode d'évaluation de ce flux numérique que se caractérise principalement les méthodes numériques en volumes finis. Notons aussi que le formalisme le plus couramment employé pour la discrétisation volumes finis repose sur une approche "cell-centered" où le stockage des valeurs est réalisé au centre des cellules, même si des approches de type cell-vertex sont aussi possibles [Lamarque, 2007].

#### 7.2.2.2 Schémas classiques pour les maillages structurés

**La méthode Godunov**

A l'instant initial, la fonction étudiée est moyennée dans toutes les cellules du maillage. Pour les calculs suivants, on considère une fonction constante par morceaux $u(x, t_n)$ issue des valeurs moyennes dans les cellules à l'instant $t_n$ comme illustré dans la Fig.(7.3). Des discontinuités sont

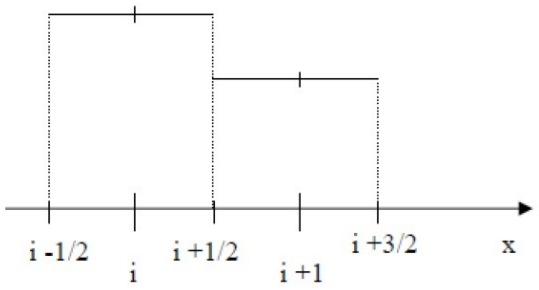


**Figure 7.3** – *Valeurs moyennes de la solution pour la méthode Godunov*

présentes à chaque interface ; l'obtention du flux numérique entre deux cellules repose ainsi sur la résolution d'un problème de Riemann local entre les instants $t_n$ et $t_{n+1}$. Deux types de solveur de Riemann sont employés : ceux qui adoptent une résolution exacte et ceux qui emploient une méthode approchée [Roe, 1981; Osher and Solomon, 1982]. Pour plus détails sur ces approches, de nombreuses techniques sont décrites dans [Toro, 2009].
La méthode Godunov est d'ordre un en espace ; elle est relativement simple à mettre en place mais elle diffuse fortement surtout dans les zones de forts gradients. Le choix d'un CFL proche de l'unité par valeurs inférieures limite la diffusion, CFL = 1 étant le cas optimal. On rappelle l'expression du critère de stabilité CFL :

$$\mathrm{CFL} = \frac{\max\limits_i u_i^n \Delta t}{\Delta x} \tag{7.16}$$

Ce type de méthodes conduit à une méthode numérique dite monotone et dont on peut démontrer la convergence vers la solution faible entropique unique. Il admet de très bonne propriétés de stabilité mais la qualité de l'approximation n'est pas suffisante et une montée en ordre aussi bien en espace qu'en temps est nécessaire pour les applications.

**La méthode MUSCL**

Pour améliorer la précision par rapport à la méthode Godunov, en particulier la résolution des zones à forts gradients, la méthode MUSCL (Monotonic Upstream-Centered Scheme for Conservation Law) reprend les différentes étapes de la méthode Godunov à la différence que la fonction de reconstruction dans chaque cellule n'est plus une fonction constante par morceaux mais affine dont l'expression pour la cellule $i$ étudiée est : $u(x, t_n) = U_i^n + \sigma_i^n(x - x_i)$. La variable $\sigma$ est la pente de la reconstruction dans chaque cellule. Le cas particulier où $\sigma = 0$ correspond à la méthode de Godunov. Des variations importantes de pente d'une cellule à l'autre peuvent entraîner des oscillations artificielles de la solution, voire une perte de stabilité. Pour conserver la stabilité et la convergence, plusieurs concepts ont été introduits avec la notion de schémas TVD (Total Variation Dimishing) introduisant une limitation de la pente pour obtenir de bonnes propriétés de stabilité, même si ces propriétés ne suffisent pas à assurer la convergence vers la solution faible dans tous les cas.

Des limiteurs de pente, aussi appelés "algorithmes de monotonie", ont alors été introduits. Il s'agit, sur un intervalle d'espace, de réduire la variation totale au cours du temps. Cette variation totale s'écrit : $TV(U^n) = \sum_{-\infty}^{+\infty} \left(|U_{i+1}^n - U_{i-1}^n|\right)$. Pour exemple, le limiteur $minmod\,\sigma$ est couramment employé :

$$\begin{cases} \sigma_G \text{ si } |\sigma_G| < |\sigma_D| \text{ et } \sigma_G\sigma_D > 0 \\ \sigma_D \text{ si } |\sigma_D| < |\sigma_G| \text{ et } \sigma_G\sigma_D > 0 \\ 0 \text{ si } \sigma_G\sigma_D < 0 \end{cases} \tag{7.17}$$

Pour plus de détails, on se réfèrera aux travaux originaux de Van Leer [Van Leer, 1979].
Dans l'exemple donnée en Fig.(7.4), la pente de la cellule $i$ a été mise à zéro afin de respecter le changement de signe entre l'amont et l'aval. Les limiteurs de pente sont au centre de l'approche MUSCL. Ce type de méthodes va donc ramener la précision de l'approximation spatiale aux extrema à l'ordre un, ce qui peut sembler insatisfaisant par rapport au programme proposé. De nombreuses études ont été menées afin de développer des limiteurs de pente performants.

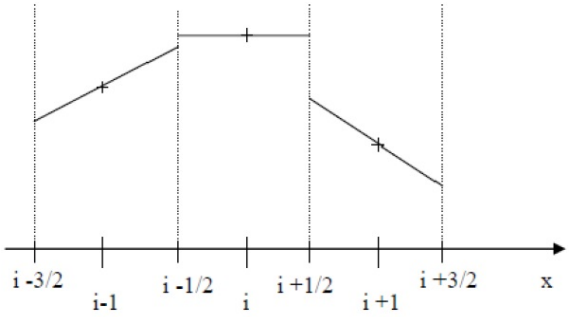


**FIGURE 7.4** – *Valeurs moyennes de la solution pour la méthode MUSCL*

Une fois la reconstruction menée, il s'agit à nouveau de résoudre un problème de Riemann entre deux instants à chaque interface. Le calcul des flux numériques se fait à l'aide des valeurs des fonctions affines aux interfaces. La méthode est donc très proche de celle de Godunov.
Cependant, elle est alors d'ordre un en temps et deux en espace et pose deux problèmes. Dans un premier temps, la méthode introduite, même si elle est plus précise et stable $L^\infty$ peut ne pas converger, y compris dans des cas de solutions régulières ; dans un second temps, la précision globale reste limitée par la précision temporelle et se trouve donc d'ordre un. L'emploi d'une méthode de type Runge-Kutta d'ordre deux préservant le caractère TVD et la stabilité permet de remédier aux deux problèmes, mais on doit utiliser un CFL $1/2$ et par ailleurs, comme indiqué dans [Daru and Tenaud, 2004; Hesthaven and Warburton, 2008], le caractère compact du schéma commence à se perdre. La méthode dégénère vers une méthode d'ordre un dans le voisinage des singularités de la solution.

**Les méthodes de type MacCormack et OSMP avec limitation de flux**
Pour remédier aux deux points limitants mentionnés ci-dessus, des schémas d'ordre au moins deux en temps et en espace ont été proposés et utilisés dans le domaine de la dynamique des gaz. Dans un premier temps, afin d'obtenir une approche précise à l'ordre deux en temps et en espace le schéma centré de MacCormack a été particulièrement utilisé. Il apporte aussi l'avantage certain de ne pas avoir à résoudre de problème de Riemann, mais repose simplement sur l'évaluation des flux dans un formalisme de prédicteur-correcteur. Généralisés par Lerat et Peyret [Lerat and Peyret, 1974], ces schémas nécessitent l'ajout de viscosité artificielle afin d'être stabilisés lors de la résolution de singularités. Pour des précisions sur l'utilisation de ces schémas, on pourra se référer à la thèse de J. Dupays [Dupays, 1996] (où ces schémas ont été utilisés pour la résolution de la phase gazeuse et étendu à l'étude de la phase dispersée) ainsi qu'aux travaux d'E. Daniel [Daniel et al., 1993; Daniel, 2000]. Le lien entre l'ajout de viscosité artificielle et les propriétés potentiellement TVD du schéma a été étudié et repose sur les travaux de Jameson [Jameson et al., 1981; Jameson, 1995]. Ces schémas ont été implémentés dans le code de recherche SIERRA de l'ONERA et sont de nouveau utilisés dans [Dupif et al., 2015b; Dupif, 2017].
Une autre approche, appelée OSMP, non utilisée car elle ne s'étend pas aux cas des maillages non structurés est basée sur une approche de type Lax-Wendroff modifiée par un terme de limitation

de flux avec un esprit complètement différent puisque l'on travaille ici sur un schéma à un pas et non pas sur une utilisation extensive des méthodes de Runge-Kutta pour assurer l'ordre élevé en temps une fois que l'on a atteint l'ordre élevé en espace. Ces travaux permettent une montée en ordre arbitraire tout en garantissant une propriété de compacité du stencil et une propriété de préservation de monotonie, moins forte que la propriété TVD, mais qui permet de ne pas avoir de réduction d'ordre aux extrema [Daru and Tenaud, 2004].
Comme ces deux types de méthodes ne sont pas envisagés dans le cadre de simulations sur des maillages non structurés quelconques et ne font pas l'objet d'études dans ce travail, nous ne donnons pas plus de détails.

**Les méthodes ENO/WENO**
Dans l'optique de maintenir la convergence vers la bonne solution faible entropique en présence de singularités et de monter en ordre loin de ces singularités, les méthodes dites TVB pour (Total Variation Bounded) admettent l'existence d'oscillations faibles décroissantes avec le pas $\Delta x$. Les méthodes ENO (Essentially Non Oscillatory) et WENO (Weighted Essentially Non Oscillatory) et présentées dans [Shu, 1997] rentrent dans cette classe de méthodes. Leur principe de base repose sur une reconstruction de la solution par une interpolation par fonctions polynomiales discrètes sur des groupes de cellules nommés stencils. Pour chaque cellule, il est nécessaire d'avoir les valeurs de la solution aux interfaces. Le polynôme d'interpolation de degré au moins $k-1$ pour une approximation d'ordre $k$ sur $k$ cellules se présente sous la forme suivante :

$$p_i(x) = u(x) + O(\Delta x^k) \tag{7.18}$$

Les valeurs aux bords de la cellule vérifient : $u^-_{i+\frac{1}{2}} = p_i(x_{i+\frac{1}{2}})$ et $u^+_{i-\frac{1}{2}} = p_i(x_{i-\frac{1}{2}})$.
On constate que les méthodes ENO/WENO reposent essentiellement sur le choix du stencil toujours dans le but de supprimer les oscillations tout en conservant un ordre élevé en espace qui est à relier au nombre de cellules du stencil.
Plusieurs stratégies répondent à ce problème, c'est la distinction à faire entre ENO/WENO. La méthode ENO repose sur le choix d'un stencil fixe dont le choix de la position pour chaque cellule est optimisé afin de couvrir la zone la plus régulière possible. La recherche de la différence non divisée minimale pour chaque cellule permet d'éviter les zones de discontinuités mais le changement de stencils pour les moindres variations des différences non divisées dégrade la régularité du flux. La méthode WENO garantit la régularité du flux dans les zones régulières car il ne s'agit pas de choisir un stencil optimal autour de la cellule mais de considérer le barycentre de tous les stencils possibles avec des coefficients pondérateurs limitant l'impact de la discontinuité. L'ordre en espace de la méthode sera au plus de $2k-1$ pour une combinaison de stencils à $k$ cellules. Cette règle est à méditer car pour des stencils comprenant une irrégularité, les coefficients pondérateurs limitent leurs impacts. Dans ces cas, l'ordre en espace de la méthode est inférieur à $2k-1$. Ces schémas ont été implémentés dans un code de recherches (cf. chapitre 9) dans le cadre de la résolution des équations d'Euler en dimension 1 pour des études de couplage acoustique avec un brouillard de particules mais sont difficilement utilisables dans le cadre de maillages non structurés quelconques même s'il existe des études dans ce sens [Abgrall, 1994; Hu and Shu, 1999]. Si l'on se cantonne à des simulations sur maillages structurés cartésiens, il semble que l'approche la plus adaptée en termes de précision et de coût est l'approche OSMP pour la simulation numérique directe même si ce n'est pas l'objectif de notre contribution.

#### 7.2.2.3 Discussion sur les schémas d'ordre élevé et utilisation pour les maillages non structurés généraux

Nous avons vu que dans le cadre de maillages cartésiens, il existe des stratégies pour monter en ordre tout en préservant de bonnes propriétés de stabilité de la solution pour la dynamique des gaz. Dans le cadre de maillages non structurés, la situation est un peu différente. Deux stratégies sont envisageables pour améliorer la précision de la solution : soit l'utilisation d'un maillage beaucoup plus fin soit le développement de schémas d'ordre élevé. Le raffinement de maillages est techniquement facile à réaliser mais le nombre de cellules d'une configuration 3D devient rapidement conséquent et conduit à des coûts de calcul rédhibitoires. En pratique, on réalise un maillage dans l'optique de résoudre les échelles spatiales qui nous intéressent et on s'autorise éventuellement à modéliser les plus petites échelles à l'aide de modèles de sous-mailles comme cela est le cas dans l'approche LES pour la turbulence.
On cherche essentiellement à développer des méthodes d'ordre élevée à appliquer sur des maillages de taille raisonnable pour des simulations industrielles. Notons que l'ordre en espace n'est pas une

condition suffisante ; celui-ci peut être élevé alors que le schéma est pénalisé par une mauvaise constante de convergence. De plus, les méthodes d'ordre élevé rencontrent bien souvent des problèmes de stabilité ce qui nécessite finalement l'emploi de techniques de stabilisation telles que des limiteurs qui ont pour conséquence une réduction de la précision. De plus, cette diminution de la précision est plus marquée sur des maillages non structurés sur lesquels les limitations sur le gradient entraîne une forte dissipation numérique.
Les méthodes ENO/WENO sont intéressantes dans la mesure où elles évitent l'emploi de limiteurs via une sélection dynamique des stencils. Cependant, l'algorithme de reconstructions multiples des solutions sur ces stencils ainsi que l'interpolation polynomiale sur un maillage non structuré constitué de polyèdres quelconques sont des limitations fortes. La généralisation de ces schémas sur maillages généraux n'est pas triviale et s'avère coûteuse. Ces approches ne sont donc pas pertinentes pour un code de calcul industriel.
La première approche pour monter en ordre tout en préservant les propriétés de stabilité est l'approche de volumes finis standard à l'ordre deux en temps et en espace couplée à l'approche MUSCL à travers un travail détaillé sur la limitation de pente [Le Touze et al., 2015] et sera retenue dans ce travail. Cette approche est robuste et l'on verra qu'elle peut être étendue de manière très efficace à la résolution de la phase dispersée. En effet, elle possède de très bonnes propriétés sur le plan de l'efficacité computationelle et a été implémentée dans le code CEDRE présenté dans la partie IV. La principale limitation de cette approche est liée au fait qu'elle reste compacte dans la mesure où l'ordre visé reste l'ordre deux en temps et en espace [Hesthaven and Warburton, 2008]. On peut aussi envisager une approche de montée en ordre plus élevé dans le même formalisme et cela a été proposé récemment. Dans [Haider, 2009; Haider et al., 2014], la montée en ordre sur des maillages non structurés repose sur : 1- une augmentation de la précision via un travail sur les méthodes de reconstruction de polynômes de degré élevé pour le calcul des pentes, 2- une implémentation dédiée qui permet de respecter la capacité parallèle du code de calcul dans le contexte d'une décomposition de domaine du fait de l'extension des stencils 3- une amélioration des stratégies de limitation et de préservation de la positivité. Cependant, l'efficacité algorithmique de ce type d'approche sur architecture massivement parallèle reste limitée et la stabilité de ces méthodes dans des cas un peu extrêmes ainsi que leur extension à la phase dispersée reste problématique. On en conclut que l'amélioration des méthodes classiques de type MUSCL sur maillages non structurés généraux reste actuellement l'alternative la plus pertinente pour les codes industriels.
Une autre famille de méthodes de résolution d'ordre élevé suscite un intérêt croissant : ces schémas reposent sur une approche aux éléments finis. Cette dernière est basée sur une projection du champ sur des fonctions de forme reliant les points du domaine qui constitue le maillage. Les propriétés de ces fonctions de forme classifient les méthodes numériques dont notamment les méthodes Galerkin Discontinues [Cockburn, 2001; Hesthaven and Warburton, 2008; Zhang et al., 2012] (ou DG pour Discontinuous Galerkin en anglais).
L'intérêt majeur d'une méthode DG par rapport à une méthode volumes finis réside dans le fait d'éviter des reconstructions sur des voisinages étendus pour récupérer de l'information, propriété que l'on a naturellement dans le contexte des éléments finis. On veut cependant éviter la résolution implicite des propriétés de conservation pour l'intégration de problèmes d'évolution et c'est à ce niveau que la partie "discontinue" intervient pour garantir une localité de la formulation du schéma. En dépit de leurs avantages, les méthodes DG sont encore peu mises en oeuvre au sein de codes industriels (citons le code PADGE du DLR) et la question du coût calcul est une question récurrente dans le domaine. Cet axe de recherches pourrait permettre l'apparition d'outils nouveaux et utiles ; il fait l'objet d'études au sein de l'ONERA mais ne sera pas poursuivi dans le cadre de ce travail car on se focalise sur le code CEDRE, et pour des raisons de pérennisation, le passage à ce type de nouvelles méthodes est difficilement envisageable.

### 7.2.3 Résolution du transport de la phase dispersée modélisée comme un fluide hypercompressible

#### 7.2.3.1 Schémas dédiés à la dynamique des gaz sans pression en maillages structurés

Dans le contexte des écoulements de fluides hypercompressibles, la présence des zones de vides et des zones de forts gradients sont des contraintes fortes et requièrent des schémas robustes permettant de garantir la résolution des singularités et le maintien de la positivité de la solution. La stabilité de la méthode dans le cas de formation de "$\delta$-shock" doit être garantie à tout instant.
Même si des approches de type MacCormack [Dupays, 1996] avec viscosité artificielle bien ajustée ou des approches de type décentrée MUSCL reposant sur la résolution d'un problème de Riemann

aux interfaces [Daniel et al., 1993] ont été utilisées, elles ne permettent pas d'avoir une méthode toujours robuste et le traitement des singularités avec ces méthodes conduit à des difficultés [Dupif et al., 2015b]. Ainsi, l'utilisation des schémas classiques présentés précédemment n'est pas immédiat.
De plus, la résolution des systèmes d'équations de conservation sur des moments telles les méthodes MF introduit une difficulté supplémentaire : une contrainte de réalisabilité sur les moments expliquée dans §5.1.2. Il s'agit de s'assurer que le vecteur des moments reste dans l'espace des moments après la phase de transport, y compris des zones de vide ou des singularités apparaissent.
Dans le domaine de la dynamique des gaz sans pression, le développement de schémas cinétiques est approprié. Dans ces approches, le calcul des flux à l'interface des cellules est évalué à partir des lignes caractéristiques de l'écoulement reconstruites à l'échelle d'un problème monodimensionnel, conduisant à une résolution exacte de l'évolution temporelle du flux une fois que la reconstruction à l'ordre deux a été menée dans chaque cellule de calcul. Par ailleurs, l'ordre deux en temps et en espace a été obtenu avec une méthode à un pas.
Pour le transport de la phase dispersée dans le cadre des méthodes OSM, un schéma cinétique d'ordre deux avec limiteurs de pentes a été développé pour des maillages structurés dans [de Chaisemartin, 2009] sur la base des travaux de [Bouchut et al., 2003]. Ce schéma garantit la positivité du nombre de gouttes et de la masse ainsi qu'un principe de maximum local sur la vitesse, et par conséquent une stabilité qui conduit à une grande robustesse du schéma avec une méthode d'ordre deux en temps et en espace, tout en limitant au maximum la diffusion numérique [de Chaisemartin, 2009]. L'avantage de cette méthode est qu'elle garantit aussi le transport réalisable des méthodes de moments [Massot et al., 2009; Kah, 2010; Kah et al., 2012; Vié et al., 2013].
Les schémas cinétiques sont toutefois limités à des maillages cartésiens ce qui est une limitation forte pour des configurations industrielles où l'on souhaite utiliser des maillages non structurés. Dans le cadre de la dynamique des gaz sans pression, l'utilisation de schémas cinétiques avec un niveau de modélisation supérieur implique une pression granulaire comme dans [Simoes, 2006].
Des extensions basées sur les schémas de relaxation ont été proposées récemment et conduisent au même niveau de robustesse [Boileau et al., 2015] pour les gaz sans pression. Outre la stabilité et la précision de ces schémas, un autre avantage est la capacité de coupler sans difficulté des zones de gaz sans pression et des zones où une pression granulaire peut apparaître du fait des croisements de trajectoires à petite échelle, simplement à travers du schéma numérique sans avoir à gérer d'interfaces [Boileau et al., 2015]. Ce type de schémas peut s'étendre aux maillages non structurés mais il n'a pas été étudié dans cette contribution car cette approche est difficilement transposable dans le code CEDRE.

#### 7.2.3.2 Stratégie pour les maillages non structurés généraux

L'extension des approches cinétiques à des maillages non structurés est difficile et son incapacité à s'étendre à des niveaux de modélisation plus fins en fait un candidat réservé à la simulation numérique directe sur maillages cartésiens où elle apporte une précision inégalée. L'extension à des maillages non structurés se fait à travers les schémas classiques MUSCL avec solveur de Riemann comme indiqué dans [Bouchut et al., 2003]. La limitation doit se faire sur les variables transportées, c'est-à-dire sur la densité et la vitesse. Une stratégie basée sur une méthode MUSCL/HLL réalisable et précise à l'ordre deux [Vié et al., 2015] est intéressante : elle est applicable sur des maillages non structurés généraux mais elle ne porte pas sur la résolution des systèmes d'équations utilisés dans cette thèse.
Les méthodes de type MUSCL sont relativement peu coûteuses et moins contraignantes pour une généralisation à n'importe quel type de maillages. Elles souffrent cependant d'un manque de précision car elles sont dissipatives. Elles peuvent également souffrir de problèmes de robustesse dans les zones de très forts gradients comme expliqué dans [Le Touze, 2015]. Parmi les schémas MUSCL, on distingue les méthodes monopentes (monoslope) des méthodes multipentes (multislope). Pour les premières, un unique gradient est utilisé pour évaluer les reconstructions sur les différentes faces de la cellule. L'approche multipente introduite dans [Clauzon, 2008; Buffard and Clain, 2010] consiste à calculer la reconstruction au niveau d'une face via une pondération de plusieurs pentes scalaires déterminées à partir de l'analyse des cellules amont et aval. Cette stratégie présente deux inconvénients : 1- elle est difficilement applicable aux maillages complètement non structurés 2- la stabilité du schéma n'est pas garantie lorsque les reconstructions sont déterminées au barycentre des faces. Une nouvelle méthode multipente [Le Touze et al., 2015] a été proposée afin de lever ces deux limitations. La procédure de reconstruction respecte maintenant le principe du maximum ; la méthode est consistante à l'ordre deux et est $L^\infty$ stable. L'emploi de limiteurs peu dissipatifs conduit à une amélioration de la précision. Les contraintes sur la topologie et la régularité du

maillage ont également été supprimées. Une utilisation sur des maillages 3D constitués de polyèdres quelconques est pertinente [Le Touze, 2015] et a démontré une grande efficacité sur des configurations industrielles basées sur des maillages fixes et réalisées avec le code CEDRE. Par rapport à des méthodes d'ordre élevé ou à une approche DG, ces schémas restent dissipatifs, même si l'on arrive à une sorte d'optimum avec l'approche actuelle multipente en termes de stabilité et précision. Toutefois, un inconvénient apparaît pour réaliser des calculs avec des maillages mobiles car le coût de l'algorithme de recherche des voisins et du calcul des pentes devient très important s'il doit être évalué à chaque pas de temps. Un effort d'optimisation reste à mener sur ce point car l'emploi de maillages mobiles pour suivre la régression du surface du propergol est actuellement un axe majeur de développement.
La question de la montée en ordre, en particulier pour limiter la dissipation numérique aux extrema, se pose de manière relativement cruciale. Par contre, on doit trouver une façon appropriée permettant d'obtenir à la fois la robustesse et la stabilité visée dans la résolution des gaz sans pression et la préservation de l'espace des moments, tout en maintenant des ordres de convergence élevés dans les zones régulières. De récents schémas d'ordre élevé basés sur une méthode DG sont en cours de validation [Larat et al., 2012; Sabat et al., 2014; Sabat, 2015] sur des maillages structurés et non structurés. Les objectifs de robustesse et de précision, et surtout la contrainte de réalisabilité sont atteints avec l'approche DG associée à une stratégie de projection convexe. Le développement de cette famille de schémas pour les écoulements à phase dispersée décrits par des méthodes de moments est une réelle avancée pour l'amélioration du compromis robustesse/précision des méthodes eulériennes. Les premières comparaisons avec des résultats de référence obtenus avec une approche lagrangienne ont montré qu'elles sont performantes et compétitives. Pourtant, dans l'optique d'une implémentation et d'une utilisation dans les codes industriels actuels, les schémas avancés de type DG ne sont pas encore mûrs. En effet, pour les mêmes raisons que celles présentées pour la résolution de la phase gazeuse, il est assez difficile de les mettre en place sans modifications profondes du code. Cependant, le développement de ces schémas doit se poursuivre car ils présentent un véritable intérêt d'une part pour le traitement de zones avec de forts rapports de densité et d'autre part pour une application sur des maillages non structurés généraux.

## Conclusion du chapitre 7

Après avoir mis en évidence la pertinence d'une stratégie de splitting pour l'intégration temporelle du système couplé gaz-particules au sein des codes industriels, une discussion sur les méthodes de résolution spatiale des opérateurs de transport a été proposée. Il reste maintenant à proposer une stratégie innovante d'intégration pour l'opérateur des termes sources avec prise en compte des transferts de masse pour les sprays réactifs. Il s'agit de traiter simultanément les termes d'échanges avec la phase gazeuse ainsi que le transport des variables de la phase dispersée au sein de l'espace des phases. Ce développement qui constitue un des axes majeurs de développement de cette thèse doit respecter à tout moment le critère de réalisabilité intrinsèque aux méthodes de moments.

# Chapitre 8

# Développement de schémas d'intégration des termes sources réactifs pour les méthodes MF

*Ce chapitre est consacré aux développements et à la validation numérique des schémas d'intégration pour les termes sources réactifs écrits dans le contexte des méthodes TSM-MF. Dans une première partie, nous présentons la dérivation complète d'un schéma dédié à l'intégration simultanée des termes intra-sectionnels pour le couplage avec le gaz et des flux entre sections, nommée schéma SRST. En outre, nous soulignons les contraintes numériques inhérentes aux calculs des flux entre sections. En effet, les conditions de réalisabilité sur les moments en taille doivent être respectées ce qui n'est pas garanti avec un schéma d'intégration traditionnel. L'apport par rapport aux précédents schémas proposés dans [Dufour, 2005; Laurent, 2006; de Chaisemartin, 2009] est significatif car ces derniers étaient limités à l'étude de lois d'évaporation trop simples pour lesquels le taux d'évolution des gouttes est le même quelle que soit la taille. Ensuite, nous proposons un schéma d'intégration similaire mais dédié à l'évolution des moments sur les masses d'aluminium et d'alumine tels qu'introduits par la méthode MF bicomposant développée dans §6.2. Dans une seconde partie, nous proposons un schéma cinétique, aussi appelé schéma SKE, approprié aux cas purement évaporatifs i.e. ne prenant pas en compte la force de traînée et le chauffage des gouttes. Cette méthode trouve un intérêt particulier dans le calcul précis des flux sectionnels, et ce même quand le taux d'évaporation varie fortement entre les différentes tailles de gouttes. Dans la dernière partie, nous vérifions la qualité de la solution numérique obtenue avec les nouveaux schémas pour différents paramètres numériques tels que le pas de temps et la discrétisation de l'espace des tailles. Ces vérifications sont réalisées via des simulations 0D sans prise en compte d'une phase gazeuse ; l'évaporation des gouttes est ainsi pilotée par des lois d'évaporation pour lesquelles des solutions analytiques de l'évolution de la NDF existent. La dernière étude constitue une évaluation qualitative de la méthode MF bicomposant et de son schéma SRST au travers de la validation des transferts de masse et d'énergie entre un spray polydisperse bicomposant et une phase gazeuse monoespèce.*

## 8.1 Stratégie numérique d'intégration des termes sources pour l'approche Multi-Fluide à deux moments en taille

### 8.1.1 Contraintes numériques pour l'intégration des termes de flux entre sections

On rappelle que les méthodes eulériennes MF reposent sur le choix d'une approche continue de l'espace des tailles et sur une intégration du système semi-cinétique Eq.(4.19) par une méthode de type Volumes Finis sur chacune des sections. Le phénomène d'évaporation correspond à une évolution temporelle de la fonction de distribution dans l'espace des tailles. Le point clé porte ici sur l'intégration simultanée des termes sources d'échange avec la phase gazeuse et des flux entre sections successives.
Dans l'approche OSM, il n'y a que l'évolution de la concentration massique à prendre en compte, ce

qui signifie que seuls des flux de masse sont à évaluer. Des schémas d'intégration temporels dédiés aux EDO sont suffisants pour traiter ces termes qui ne présentent aucune difficulté numérique significative.
Pour des méthodes utilisant plusieurs moments en taille, la NDF est mieux décrite dans chaque section grâce à une fonction de reconstruction idéalement choisie comme présenté dans §5.1.2. De plus, l'évaluation des flux aux bornes des sections est améliorée. Cependant, la principale contrainte de ces méthodes est le respect des conditions de réalisabilité à chaque instant et pour chaque section. Pour les méthodes TSM-MF, les moments $n^{(k)}$ et $m^{(k)}$ de la section $k$ doivent respecter la relation donnée par l'Eq.(4.27).
La résolution d'une collection de systèmes d'EDO à chaque position $\mathbf{x}$, comme exprimé dans l'Eq.(7.3), ne peut pas être entreprise avec un schéma d'intégration explicite classique, par exemple une méthode Runge-Kutta (RK). Il a été observé des problèmes de stabilité pour des pas de temps raisonnables. Ces situations apparaissent plus spécifiquement à la fin de l'évaporation dans une section lorsque celle-ci se vide i.e. quand la distribution est proche de la borne inférieure et devient raide.
Des méthodes implicites sont envisageables mais elles sont coûteuses et complexes à mettre en place dans la mesure où le nombre de dépendances entre toutes les variables est élevé.
Nous nous sommes alors concentrés sur le développement de schémas dédiés à la détermination des flux sectionnels de manière à respecter les conditions de réalisabilité des méthodes TSM-MF. Nous avons également pour objectif d'intégrer dans le même temps la force de traînée et le terme d'échange de chaleur. Finalement, le dernier point d'amélioration des schémas présentés par la suite est de prendre en compte des lois d'évaporation complexes où le taux de variation de la taille est fortement dépendant de l'état des gouttes et de la phase gazeuse comme cela est le cas pour les modèles d'évaporation présentés dans §3.4.2.

### 8.1.2 Dérivation du schéma SRST : "Simultaneous Reactive Source Term scheme"

Ce nouveau schéma a été développé dans l'esprit des développements proposés dans [Massot et al., 2010a; Kah, 2010] où le spray est décrit par des méthodes de moments et les lois d'évaporation sont conditionnées par la taille des gouttes. La principale difficulté est d'évaluer correctement les concentrations en nombre et en masse des gouttes transférées de la section $(k+1)$ à la section $(k)$ ou de la section $(k)$ à la section $(k+1)$ selon qu'il s'agisse d'évaporation ou de condensation. Par soucis de clarté, le nouveau schéma est présenté uniquement pour l'évaporation à la manière d'une approche upwind pour des échanges limités uniquement des sections supérieures à inférieures. Un des points forts de la méthode est de pouvoir intégrer simultanément les termes sources intra-sectionnels, que sont la traînée et le transfert de chaleur, et les flux d'échanges entre sections. Ce schéma correspond à une intégration explicite en temps. Plusieurs hypothèses sont faites : nous supposons un taux de variation moyen de la taille $K^{(k)}$ constant sur la section sur le pas de temps considéré. Il est déduit de la relation définie par l'Eq.(3.50) qui lie le taux de transfert de masse à celui de changement de taille :

$$K^{(k)} = \frac{4\sqrt{\pi}}{\rho_l} \frac{\displaystyle\int_{S_{k-1}}^{S_k} S^{-1/2}\, \dot{m}_p(S)\, \kappa^{(k)}(S) \mathrm{d}S}{\displaystyle\int_{S_{k-1}}^{S_k} \kappa^{(k)}(S) \mathrm{d}S} \tag{8.1}$$

A l'instant $t_n$ et pour la section $[S_{k-1}, S_k]$, nous déterminons la fonction de forme $\kappa^{(k)}$ de la distribution à partir des moments $n_n^{(k)}$ et $m_n^{(k)}$. Ensuite, comme illustré par la Fig.(8.1), nous calculons les flux exprimés au travers des concentrations en nombre et en masse qui quittent la section $k$. Par soucis de clarté, nous définissons $\alpha = \dfrac{\rho_l}{6\sqrt{\pi}}$.

$$n_{out}^{(k)} = \int_{S_{k-1}}^{S_{k-1}+K^{(k)}\Delta t} \kappa^{(k)}(S) \mathrm{d}S \qquad m_{out}^{(k)} = \alpha \int_{S_{k-1}}^{S_{k-1}+K^{(k)}\Delta t} S^{3/2} \kappa^{(k)}(S) \mathrm{d}S \tag{8.2}$$

Les intégrales ont la même forme que celles présentées dans les Eq.(5.13)&(5.15). On peut remarquer que les sources sur les concentrations massiques donnent des formules analytiques complexes pour la reconstruction exponentielle alors que l'approche affine permet d'évaluer facilement les flux.

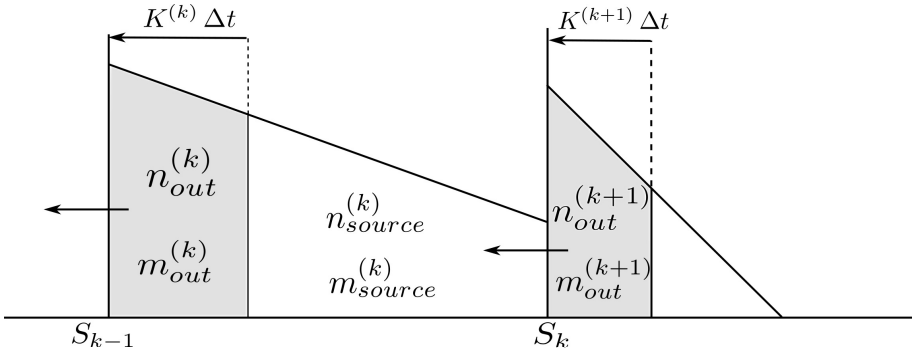


**FIGURE 8.1** – *Principe du schéma SRST illustré avec la reconstruction affine*

Nous proposons une stratégie de quadrature à un point sur chacun des deux intervalles nommés sous-sections : la sous-section "out" $[S_{k-1}, S_{k-1} + K^{(k)}\Delta t]$ et la sous-section "source" $[S_{k-1} + K^{(k)}\Delta t, S_k]$. Les abscisses des points de quadrature sont $s_{source}^{(k)}$ et $s_{out}^{(k+1)}$ qui sont des surfaces moyennes calculées sur les sous-sections :

$$s_{source}^{(k)} = \left(\frac{m_{source}^{(k)}}{\alpha\, n_{source}^{(k)}}\right)^{2/3} \qquad s_{out}^{(k+1)} = \left(\frac{m_{out}^{(k+1)}}{\alpha\, n_{out}^{(k+1)}}\right)^{2/3} \tag{8.3}$$

Les moments obtenus sur ces sous-sections sont $(n_{source}^{(k)}, m_{source}^{(k)})$ et $(n_{out}^{(k+1)}, m_{out}^{(k+1)})$ sont donnés par :

$$\begin{cases} n_{source}^{(k)} = n_n^{(k)} - n_{out}^{(k)} & m_{source}^{(k)} = m_n^{(k)} - m_{out}^{(k)} \\ n_{out}^{(k+1)} = \displaystyle\int_{S_k}^{S_k + K^{(k+1)}\Delta t} \kappa^{(k+1)}(S)\mathrm{d}S & m_{out}^{(k+1)} = \alpha \displaystyle\int_{S_k}^{S_k + K^{(k+1)}\Delta t} S^{3/2}\kappa^{(k+1)}(S)\mathrm{d}S \end{cases} \tag{8.4}$$

Les moments $n_{n+1}^{(k)}$ et $m_{n+1}^{(k)}$ à l'instant $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ sont déterminés ainsi :

$$\begin{cases} n_{n+1}^{(k)} &= n_{source}^{(k)} + n_{out}^{(k+1)} \\ m_{n+1}^{(k)} &= \left[m_{source}^{(k)} - \dot{m}_{source}^{(k)}\Delta t\right] + \left[m_{out}^{(k+1)} - \dot{m}_{out}^{(k+1)}\Delta t\right] \end{cases} \tag{8.5}$$

où $\dot{m}_{source}^{(k)}$ et $\dot{m}_{out}^{(k+1)}$ sont les taux d'évaporation sur les sous-sections. La proposition suivante présente l'expression de ces taux d'évaporation pour assurer les conditions de réalisabilité données dans l'Eq.(4.27) pour les moments $n_{n+1}^{(k)}$ et $m_{n+1}^{(k)}$. Il est à noter que $k = \mathrm{N_{sec}}$ donc les quantités "$\mathrm{N_{sec}} + 1$" sont prises égale à zéro par convention.

**Proposition 8.1.1.** *Considérons que les deux moments en taille ($n_n^{(k)}$,$m_n^{(k)}$) pour tous les intervalles $[S_{k-1}, S_k[ \in \mathbb{R}^+$ respectent la condition de réalisabilité donnée dans l'Eq.(4.27) à l'instant $t_n$. Les moments ($n_{n+1}^{(k)}$,$m_{n+1}^{(k)}$) calculés à l'instant $t_{n+1}$ à partir de l'Eq.(8.5) assurent la condition suivante :*

$$\alpha\, n_{n+1}^{(k)}\, S_{k-1}^{3/2} < m_{n+1}^{(k)} < \alpha\, n_{n+1}^{(k)}\, S_k^{3/2} \qquad \text{ou} \qquad n_{n+1}^{(k)} = m_{n+1}^{(k)} = 0, \qquad k \in \{1, ..., \mathrm{N_{sec}}\} \tag{8.6}$$

*si les deux conditions suivantes sont respectées :*
*(i) le critère de stabilité* $\mathrm{CFL}_{evap} \equiv \max\{\mathrm{CFL}_{evap}^{(k)}, k = 1, ..., \mathrm{N_{sec}}\} \leq 1$

$$\mathrm{CFL}_{evap}^{(1)} = \frac{K^{(1)}\,\Delta t}{(S_1 - S_0)} \qquad ; \qquad \mathrm{CFL}_{evap}^{(k)} = \frac{K^{(k)}\,\Delta t}{\min\left((S_{k-1} - S_{k-2}), (S_k - S_{k-1})\right)}, \quad k \geq 2 \tag{8.7}$$

*(ii) les termes $\dot{m}_{source}^{(k)}$ et $\dot{m}_{out}^{(k+1)}$ exprimés dans l'Eq.(8.5) sur les intervalles définis par l'Eq.(8.4) sont donnés par :*

$$\begin{cases} \dot{m}_{source}^{(k)}\Delta t = \alpha\, n_{source}^{(k)} \left[\left(s_{source}^{(k)}\right)^{3/2} - \left(s_{source}^{(k)} - K^{(k)}\Delta t\right)^{3/2}\right] \\ \dot{m}_{out}^{(k+1)}\Delta t = \alpha\, n_{out}^{(k+1)} \left[\left(s_{out}^{(k+1)}\right)^{3/2} - \left(s_{out}^{(k+1)} - K^{(k+1)}\Delta t\right)^{3/2}\right] \end{cases} \tag{8.8}$$

*Démonstration.* Considérant l'Eq.(8.5) et l'Eq.(8.8), il est possible d'écrire :

$$\frac{m_{n+1}^{(k)}}{\alpha\, n_{n+1}^{(k)}} = \frac{n_{out}^{(k+1)}\left(s_{out}^{(k+1)} - K^{(k+1)}\Delta t\right)^{3/2} + n_{source}^{(k)}\left(s_{source}^{(k)} - K^{(k)}\Delta t\right)^{3/2}}{n_{out}^{(k+1)} + n_{source}^{(k)}} \tag{8.9}$$

Avec l'Eq.(8.3) et l'Eq.(8.4) et en respectant la condition CFL $K^{(k)}\Delta t \leq (S_k - S_{k-1})$, nous avons :

$$\left(s_{source}^{(k)} - K^{(k)}\Delta t\right) \in ]S_{k-1}, S_k - K^{(k)}\Delta t[ \qquad ]S_{k-1}, S_k - K^{(k)}\Delta t[ \in ]S_{k-1}, S_k[ \tag{8.10}$$

Respectant la condition CFL $K^{(k+1)}\Delta t \leq (S_k - S_{k-1})$, nous avons :

$$\left(s_{out}^{(k+1)} - K^{(k+1)}\Delta t\right) \in ]S_k - K^{(k+1)}\Delta t, S_k[ \qquad ]S_k - K^{(k+1)}\Delta t, S_k[ \in ]S_{k-1}, S_k[ \tag{8.11}$$

Avec $n_{out}^{(k+1)} \geq 0$ et $n_{source}^{(k)} \geq 0$, nous démontrons finalement la condition de réalisabilité proposée dans l'Eq.(8.6). □

Les termes sources pour la traînée et l'échange de chaleur sont évalués sur chacune des sous-sections "out" et "source" :

$$\begin{cases} \mathbf{F_{out}^{(k)}} = \alpha \displaystyle\int_{S_{k-1}}^{S_{k-1}+K^{(k)}\Delta t} \mathbf{F}(S) S^{3/2} \kappa^{(k)}(S) \mathrm{d}S \qquad \mathbf{F_{source}^{(k)}} = \alpha \displaystyle\int_{S_{k-1}+K^{(k)}\Delta t}^{S_k} \mathbf{F}(S) S^{3/2} \kappa^{(k)}(S) \mathrm{d}S \\ H_{out}^{(k)} = \alpha \displaystyle\int_{S_{k-1}}^{S_{k-1}+K^{(k)}\Delta t} H(S) S^{3/2} \kappa^{(k)}(S) \mathrm{d}S \qquad H_{source}^{(k)} = \alpha \displaystyle\int_{S_{k-1}+K^{(k)}\Delta t}^{S_k} H(S) S^{3/2} \kappa^{(k)}(S) \mathrm{d}S \end{cases} \tag{8.12}$$

Finalement, nous avons :

$$\begin{cases} \left(\rho_g \mathrm{Y_{vap}}\right)_{n+1} = \left(\rho_g \mathrm{Y_{vap}}\right)_n + \Delta t \displaystyle\sum_{k=1}^{\mathrm{N_{sec}}-1} \left(\dot{m}_{source}^{(k)} + \dot{m}_{out}^{(k+1)}\right) \\ \left(\rho_g \mathbf{u_g}\right)_{n+1} = \left(\rho_g \mathbf{u_g}\right)_n - \Delta t \displaystyle\sum_{k=1}^{\mathrm{N_{sec}}-1} \left(\left(\mathbf{F_{source}^{(k)}} - \dot{m}_{source}^{(k)} \mathbf{u}_n^{(k)}\right) + \left(\mathbf{F_{out}^{(k+1)}} - \dot{m}_{out}^{(k+1)} \mathbf{u}_n^{(k+1)}\right)\right) \\ \left(\rho_g E_g\right)_{n+1} = \left(\rho_g E_g\right)_n - \Delta t \displaystyle\sum_{k=1}^{\mathrm{N_{sec}}} \left(\left(\mathrm{H}_{source}^{(k)} + \mathbf{F_{source}^{(k)}}.\mathbf{u}_n^{(k)}\right) - \dot{m}_{source}^{(k)} \left(e_{source}^{(k)} + L_v^{(k)} + \frac{1}{2}\|\mathbf{u}_n^{(k)}\|^2\right)\right) \\ \qquad\qquad - \Delta t \displaystyle\sum_{k=1}^{\mathrm{N_{sec}}-1} \left(\left(\mathrm{H}_{out}^{(k+1)} + \mathbf{F_{out}^{(k+1)}}.\mathbf{u}_n^{(k+1)}\right) - \dot{m}_{out}^{(k+1)} \left(e_{out}^{(k+1)} + L_v^{(k+1)} + \frac{1}{2}\|\mathbf{u}_n^{(k+1)}\|^2\right)\right) \\ \left.\begin{array}{l} n_{n+1}^{(k)} = n_{source}^{(k)} + n_{out}^{(k+1)} \\ m_{n+1}^{(k)} = \left[m_{source}^{(k)} - \dot{m}_{source}^{(k)}\Delta t\right] + \left[m_{out}^{(k+1)} - \dot{m}_{out}^{(k+1)}\Delta t\right] \\ m_{n+1}^{(k)} \mathbf{u}_{n+1}^{(k)} = m_n^{(k)} \mathbf{u}_n^{(k)} - m_{out}^{(k)} \mathbf{u}_n^{(k)} + m_{out}^{(k+1)} \mathbf{u}_n^{(k+1)} + \Delta t \left(\mathbf{F_{source}^{(k)}} - \dot{m}_{source}^{(k)} \mathbf{u}_n^{(k)}\right) \\ \qquad\qquad + \Delta t \left(\mathbf{F_{out}^{(k+1)}} - \dot{m}_{out}^{(k+1)} \mathbf{u}_n^{(k+1)}\right) \\ m_{n+1}^{(k)} e_{n+1}^{(k)} = m_n^{(k)} e_n^{(k)} - m_{out}^{(k)} e_n^{(k)} + m_{out}^{(k+1)} e_n^{(k+1)} + \Delta t \left(H_{source}^{(k)} - \dot{m}_{source}^{(k)} e_n^{(k)}\right) \\ \qquad\qquad + \Delta t \left(H_{out}^{(k+1)} - \dot{m}_{out}^{(k+1)} e_n^{(k+1)}\right) \end{array}\right\} k = 1, \mathrm{N_{sec}} \end{cases} \tag{8.13}$$

Le nouveau schéma est présenté sous la forme d'une intégration explicite à une étape ce qui correspond à une intégration en temps d'ordre 1 pour les termes d'échanges avec le gaz. Pour obtenir un ordre supérieur sur la résolution de ces termes, des intégrations explicites sont possibles

telles les méthodes Runge-Kutta TVD développées dans [Shu and Osher, 1988; Gottlieb and Shu, 1998]. Par la suite, nous utiliserons les schémas d'ordre 2 et 3 tel que cela a été proposé par [Dupays et al., 1996] :

$$\begin{aligned} Q_1 &= Q_n + \Delta t\, S(Q_n) \\ Q_{n+1} &= \frac{1}{2}Q_n + \frac{1}{2}Q_1 + \frac{\Delta t}{2}S(Q_1) \end{aligned} \qquad \begin{aligned} Q_1 &= Q_n + \Delta t\, S(Q_n) \\ Q_2 &= \frac{3}{4}Q_n + \frac{1}{4}Q_1 + \frac{\Delta t}{4}\, S(Q_1) \\ Q_{n+1} &= \frac{1}{3}Q_n + \frac{2}{3}Q_2 + \frac{\Delta t}{2}S(Q_2) \end{aligned} \tag{8.14}$$

La principale contrainte est de continuer à assurer les conditions de réalisabilité. Comme les méthodes RK-TVD sont des combinaisons linéaires de pas d'intégration temporelle qui respectent ces conditions, le schéma est donc globalement réalisable.
A chaque étape du schéma de Runge-Kutta, les moments doivent être actualisés ce qui signifie de recalculer des nouveaux coefficients pour les fonctions de reconstruction dans chaque section. Le gain en temps de calcul obtenu pour l'inversion des coefficients de la fonction affine est un réel apport. Aussi, plus le nombre d'inversions est élevé, plus l'approche affine est intéressante.

### 8.1.3 Extension du schéma SRST pour le modèle MF bicomposant

On se propose ici de donner directement le schéma d'intégration des termes sources pour l'approche MF bicomposant sans détailler toutes les étapes de dérivation. La démarche est similaire à celle présentée dans §8.1.2. De plus, ce schéma n'a été validé que pour des cas sans rétrodiffusion d'alumine (cf. §8.3.3), la version présentée par la suite ne prend en compte que les transferts de masse pour l'aluminium. Le débit d'alumium évaporé par l'ensemble des gouttes de la section $(k,j)$ s'écrit :

$$\dot{m}_{al}^{(k,j)} = C\ln(1+B_T^{(k,j)})n^{(k,j)}\int_{\mu_{k-1}^{al}}^{\mu_k^{al}}\int_{\mu_{j-1}^{ox}}^{\mu_j^{ox}}\left(\frac{m_{al}}{\rho_{al}}+\frac{m_{ox}}{\rho_{ox}}\right)^{1/3}\kappa_{al}^{(k)}(m_{al})\kappa_{ox}^{(j)}(m_{ox})\mathrm{d}m_{al}\mathrm{d}m_{ox} \quad (8.15)$$

avec $C = 2\dfrac{6^{1/3}\pi^{2/3}\mu_g}{\mathrm{Pr}}$.
Les concentrations en nombre et en masse qui sont transmises entre les sections 2D sont déterminées sur des sous-sections comme c'est le cas pour le schéma SRST monocomposant. Le schéma de principe est donné en Fig.(8.2). Nous obtenons alors :

$$\begin{cases} n_{out}^{(k,j)} = n^{(k,j)}\displaystyle\int_{\mu_{k-1}^{al}}^{A_{kj}+\mu_{k-1}^{al}}\kappa_{al}\mathrm{d}m_{al} & n_{source}^{(k,j)} = n^{(k,j)} - n_{out}^{(k,j)} \\ m_{al,out}^{(k,j)} = n^{(k,j)}\displaystyle\int_{\mu_{k-1}^{al}}^{A_{kj}+\mu_{k-1}^{al}} m_{al}\kappa_{al}\mathrm{d}m_{al} & m_{al,source}^{(k,j)} = m_{al}^{(k,j)} - m_{al,out}^{(k,j)} \\ m_{ox,out}^{(k,j)} = m_{ox}^{(k,j)}\displaystyle\int_{\mu_{k-1}^{al}}^{A_{kj}+\mu_{k-1}^{al}}\kappa_{al}\mathrm{d}m_{al} & m_{ox,source}^{(k,j)} = m_{ox}^{(k,j)} - m_{ox,out}^{(k,j)} \\ m_{out}^{(k,j)} = m_{out,ox}^{(k,j)} + m_{out,al}^{(k,j)} & m_{source}^{(k,j)} = m_{source,ox}^{(k,j)} + m_{source,al}^{(k,j)} \end{cases} \quad (8.16)$$

avec $A_{kj} = \dfrac{\dot{m}_{al}^{(k,j)}\Delta t}{n^{(k,j)}}$.
En considérant qu'un seul pas d'intégration explicite comme c'est le cas dans l'Eq.(8.13), le schéma SRST bicomposant s'écrit pour la section $(k,j)$ :

$$\begin{cases} n_{n+1}^{(k,j)} & = n_{source}^{(k,j)} + n_{out}^{(k+1,j)} \\ m_{al,n+1}^{(k,j)} & = \left(m_{al,source}^{(k,j)} - \Delta t\ \frac{n_{source}^{(k,j)}}{n^{(k,j)}}\dot{m}_{al}^{(k,j)}\right) + \left(m_{al,out}^{(k+1,j)} - \Delta t\ \frac{n_{out}^{(k+1,j)}}{n^{(k+1,j)}}\dot{m}_{al}^{(k+1,j)}\right) \\ m_{ox,n+1}^{(k,j)} & = m_{ox,source}^{(k,j)} + m_{ox,out}^{(k+1,j)} \\ m_{n+1}^{(k,j)}\mathbf{u}_{n+1}^{(k,j)} & = m_{source}^{(k,j)}\mathbf{u}_n^{(k,j)} + m_{out}^{(k+1,j)}\mathbf{u}_n^{(k+1,j)} + \Delta t\left(\mathbf{F}_{\mathbf{source}}^{(\mathbf{k,j})} + \mathbf{F}_{\mathbf{out}}^{(\mathbf{k+1,j})}\right) \\ & \quad -\Delta t\left(\frac{n_{source}^{(k,j)}}{n^{(k,j)}}\dot{m}_{al}^{(k,j)}\mathbf{u}_n^{(k,j)} + \frac{n_{out}^{(k+1,j)}}{n^{(k+1,j)}}\dot{m}_{al}^{(k+1,j)}\mathbf{u}_n^{(k+1,j)}\right) \\ m_{n+1}^{(k,j)}e_{n+1}^{(k,j)} & = m_{source}^{(k,j)}e_n^{(k,j)} + m_{out}^{(k+1,j)}e_n^{(k+1,j)} + \Delta t\left(H_{source}^{(k,j)} + H_{out}^{(k+1,j)}\right) \\ & \quad -\Delta t\left(\frac{n_{source}^{(k,j)}}{n^{(k,j)}}\dot{m}_{al}^{(k,j)}e_n^{(k,j)} + \frac{n_{out}^{(k+1,j)}}{n^{(k+1,j)}}\dot{m}_{al}^{(k+1,j)}e_n^{(k+1,j)}\right) \end{cases} \quad (8.17)$$

Les termes sources d'échange avec la phase gazeuse comme la force de traînée et le terme d'échange de chaleur sont calculés à partir du formalisme introduit dans l'Eq.(8.12). Ils présentent cependant la spécificité d'une intégration sur une section 2D. Nous avons, par exemple pour le calcul de la force de traînée, l'expression suivante :

$$\mathbf{F}_{\mathbf{source}}^{(\mathbf{k,j})} = \frac{18\,\pi^{2/3}\,\mu_g\,(\mathbf{u_g}-\mathbf{u})\,n^{(k,j)}}{6^{2/3}\,\rho_p}\int_{\mu_{k-1}^{al}}^{A_{kj}+\mu_{k-1}^{al}}\int_{\mu_{j-1}^{ox}}^{\mu_j^{ox}}\frac{(m_{al}+m_{ox})\kappa_{al}\kappa_{ox}}{(\frac{m_{al}}{\rho_{al}}+\frac{m_{ox}}{\rho_{ox}})^{2/3}}\mathrm{d}m_{al}\mathrm{d}m_{ox} \quad (8.18)$$

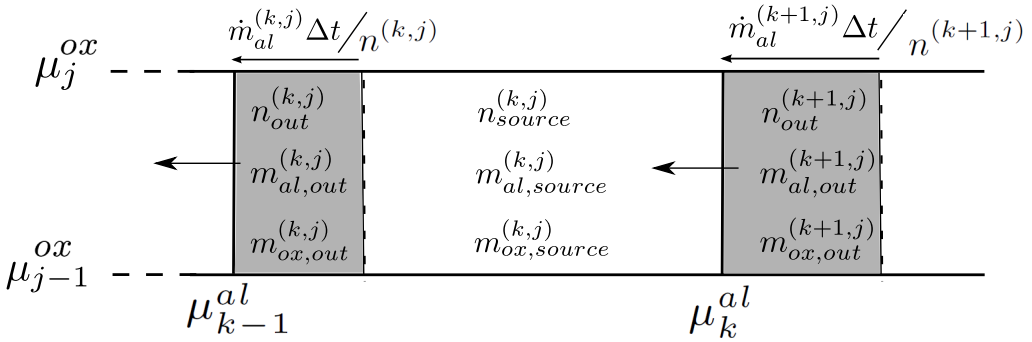


**FIGURE 8.2** – *Principe du schéma SRST pour la méthode MF bicomposant sans prise en compte de la rétrodiffusion d'alumine*

Par soucis de clarté, les équations de la phase gazeuse ne sont pas redonnées dans cette partie, le couplage étant toujours basé sur le principe de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie du système diphasique. Les méthodes à plusieurs étapes de type Runge-Kutta comme celles données par l'Eq.(8.14) sont également applicables à ce schéma.
Dans le cas général où il faut prendre en compte à la fois les transferts de masse pour l'aluminium et l'alumine, il est envisagé d'appliquer une stratégie d'intégration basée sur un splitting directionnel dans l'espace des masses à deux dimensions. Notons qu'il s'agit d'une technique couramment employée pour les problèmes d'advection dans un espace physique multidimensionnel. Dans notre cas d'étude, le schéma SRST bicomposant peut être utilisé successivement aussi bien pour le traitement des flux entre sections dans la direction de la masse d'aluminium puis de la masse d'alumine. Une illustration de la méthode est fournie en Fig.(8.3).

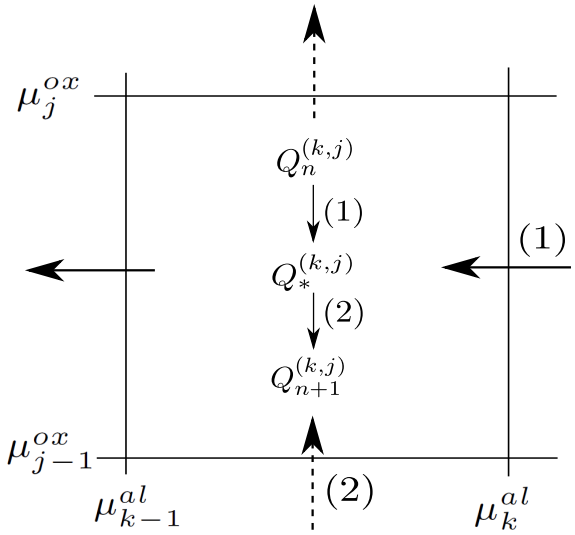


**FIGURE 8.3** – *Application du schéma SRST bicomposant dans le contexte d'un splitting directionnel dans l'espace des masses à deux dimensions ; L'étape (1) correspond à l'évaporation de l'aluminium et l'étape (2) à la condensation de l'alumine*

## 8.2 Schéma cinétique SKE dédié aux cas évaporatifs purs : "Sectional Kinetic Evaporation scheme"

Nous nous intéressons dans cette partie uniquement aux transferts de masse ; la force de traînée et le terme d'échange de chaleur dû au chauffage ne sont pas pris en compte. Pour les méthodes TSM-MF, cela signifie de traiter uniquement les termes intra-sectionnels $\mathrm{M}^{(k)}$ et les flux entre sections $\mathcal{N}^{(k)}$ et $\mathcal{E}^{(k)}$. Nous avons évoqué dans §8.1.1 les difficultés d'intégrer explicitement ces termes sources. L'évolution de la distribution en taille suit une équation de transport dans l'espace des tailles à une vitesse $K$. Nous proposons un schéma cinétique qui est dérivé directement de l'équation cinétique réduite suivante :

$$\partial_t f - \partial_S(Kf) = 0 \tag{8.19}$$

Suivant la même démarche que celle proposée pour la dérivation des méthodes TSM-MF, nous établissons un système semi-cinétique puis nous procédons à une discrétisation de l'espace des tailles. Nous obtenons finalement un système d'équations de transport pour chaque section $k$ et la vitesse d'advection correspondante est notée $K^{(k)}$ :

$$\partial_t \mathrm{U}^{(\mathrm{k})} - K^{(k)}\partial_S(\mathrm{U}^{(\mathrm{k})}) = 0, \quad k = 1, ..., \mathrm{N_{sec}} \tag{8.20}$$

où le vecteur des variables étudiées pour la section $k$ est $\mathrm{U}^{(\mathrm{k})}(t) = [(n^{(k)}, m^{(k)}, m^{(k)}\mathbf{u}^{(k)}, m^{(k)}\mathrm{e}^{(k)})]^t(t,.)$. Le calcul des taux d'évaporation $K^{(k)}$ dépend du modèle d'évaporation ou de combustion. Nous avons que $K^{(k)} > 0$, $\forall k$. Les termes $K^{(k)}$ sont vus comme des vitesses d'advection dans l'espace des tailles.
Nous choisissons une résolution explicite et nous supposons que ces vitesses sont constantes au cours d'un pas de temps et sont transportées à leur propre valeur. Ainsi, à l'interface de chaque section, nous devons déterminer la solution d'un problème de Riemann telle que : 1- pour $K^{(k)} > K^{(k+1)}$, il s'agit d'un cas de création de vide. 2- pour $K^{(k)} < K^{(k+1)}$, il s'agit d'une situation de choc. Dans ce cas précis, la vitesse du choc calculée à partir de la distribution initiale $n^0 = n(0,S)$ s'exprime de la manière suivante :

$$K^{(k)} < K_m = \frac{K^{(k+1)}\sqrt{n^0(S_k^+)} + K^{(k)}\sqrt{n^0(S_k^-)}}{\sqrt{n^0(S_k^+)} + \sqrt{n^0(S_k^-)}} < K^{(k+1)} \tag{8.21}$$

Nous adoptons une résolution explicite de l'ensemble de ces systèmes via le calcul de flux entre sections et de termes sources. Le jeu des variables $(n_{n+1}^{(k)}, m_{n+1}^{(k)}, \mathbf{u}_{n+1}^{(k)}, e_{n+1}^{(k)})$ à l'instant $n+1$ et pour la section $k$ peut être calculé à partir des quantités $(n_n^{(k)}, m_n^{(k)}, \mathbf{u}_n^{(k)}, e_n^{(k)})$ à l'instant $n$ en supposant que : $n(t_{n+1}, S) = n(t_n, S + K^{(k)}\Delta t)$.
Pour le cas avec création de vide, le système s'écrit :

$$\left\{\begin{array}{ll} n_{n+1}^{(k)} & = \displaystyle\int_{S_{k-1}+K^{(k)}\Delta t}^{S_{(k)}+K^{(k+1)}\Delta t} n(t_n,S)\mathrm{d}S \\ m_{n+1}^{(k)} & = \displaystyle\int_{S_{k-1}+K^{(k)}\Delta t}^{S_k} (\sigma - K^{(k)}\Delta t)^{\frac{3}{2}} n(t_n,\sigma)\mathrm{d}\sigma + \int_{S_k}^{S_k+K^{(k+1)}\Delta t} (\sigma - K^{(k+1)}\Delta t)^{\frac{3}{2}} n(t_n,\sigma)\mathrm{d}\sigma \\ m_{n+1}^{(k)}\mathbf{u}_{n+1}^{(k)} & = \mathbf{u}_n^{(k)} \displaystyle\int_{S_{k-1}+K^{(k)}\Delta t}^{S_k} (\sigma - K^{(k)}\Delta t)^{\frac{3}{2}} n(t_n,\sigma)\mathrm{d}\sigma \\ & \quad + \mathbf{u}_n^{(k+1)} \displaystyle\int_{S_k}^{S_k+K^{(k+1)}\Delta t} (\sigma - K^{(k+1)}\Delta t)^{\frac{3}{2}} n(t_n,\sigma)\mathrm{d}\sigma \end{array}\right. \tag{8.22}$$

Pour le cas avec un choc, la résolution du terme $n_{n+1}^{(k)}$ reste inchangé. Pour le moment $m_{n+1}^{(k)}$, on obtient :

$$\left\{\begin{array}{l} m_{n+1}^{(k)} = \displaystyle\int_{S_{k-1}+K^{(k)}\Delta t}^{S_k - K_m\Delta t + K^{(k)}\Delta t} (\sigma - K^{(k)}\Delta t)^{\frac{3}{2}} n(t_n,\sigma)\mathrm{d}\sigma + \int_{S_{k-1}-K_m\Delta t+K^{(k+1)}\Delta t}^{S_k+K^{(k+1)}\Delta t} (\sigma - K^{(k+1)}\Delta t)^{\frac{3}{2}} n(t_n,\sigma)\mathrm{d}\sigma \\ \quad + (S_{(k)} - K^{(k+1)}\Delta t)^{\frac{3}{2}} \displaystyle\int_{S_{k-1}-K_m\Delta t+K^{(k)}\Delta t}^{S_k - K_m\Delta t + K^{(k+1)}\Delta t} n(t_n,\sigma)\mathrm{d}\sigma \end{array}\right.$$

(8.23)

Comme suggéré dans §8.1.2, il est possible d'établir un critère CFL pour ce schéma cinétique. En notant $\mathrm{CFL}_{evap}^{(k)}$ le critère pour la section $k$ :

$$\mathrm{CFL}_{evap}^{(k)} = \frac{\Delta t \max(K^{(k)}, K_m)}{(S_k - S_{k-1})} < 1 \tag{8.24}$$

Finalement, nous choisissons $\Delta t$ à partir du critère le plus contraignant sur l'ensemble des sections $\mathrm{CFL}_{evap} = \min(\mathrm{CFL}_{evap}^{(k)})$.

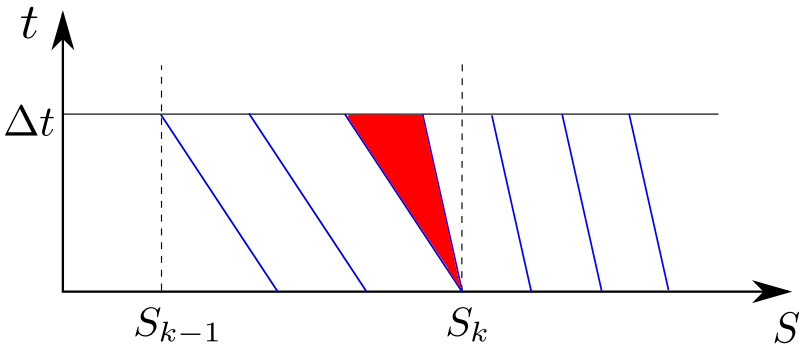


**FIGURE 8.4** – *Illustration d'un problème de Riemann pour le schéma SKE, situation de création de vide : $K^{(k)} > K^{(k+1)}$*

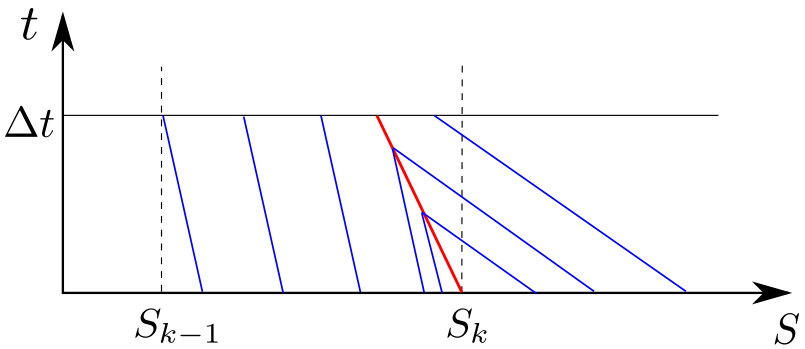


**FIGURE 8.5** – *Illustration d'un problème de Riemann pour le schéma SKE, situation de choc : $K^{(k)} < K^{(k+1)}$*

## 8.3 Vérifications 0D des nouveaux schémas d'intégration des termes sources sectionnels

Dans cette partie, nous vérifions les méthodes d'intégration des termes sources présentées précédemment, et plus spécifiquement la résolution des flux entre sections via des études 0D. Pour l'étude des schémas SRST et SKE, nous confrontons les solutions numériques à des solutions analytiques déterminées à partir de lois d'évaporation dont l'évolution est fonction de la variable taille. Dans un premier temps, nous évaluons la qualité de la méthode SRST pour différents pas de temps et discrétisations de l'espace des tailles. Puis, nous adoptons une démarche similaire pour valider le schéma cinétique mais nous ne procédons pas à la même étude des paramètres numériques influents. Finalement, nous effectuons une étude préliminaire d'un cas de gouttes en combustion avec la méthode MF bicomposant, introduite dans §6.2. Nous vérifions la méthode et le schéma SRST associé via un bilan thermodynamique entre le début et la fin de combustion puis nous apprécions l'influence d'un modèle de combustion avec prise en compte d'une calotte d'alumine inerte (cf.§2.3.3) sur la dynamique des transferts de masse. L'ensemble des calculs a été réalisé avec le code de recherche SAP1, présenté dans §9.1. Cependant, s'agissant de simulations 0D, les schémas des termes sources sont employés comme des scripts isolés, les autres méthodes numériques et modules du code ne sont donc pas présentés.

### 8.3.1 Vérifications numériques des flux d'échange entre sections du schéma SRST

Notre objectif est de vérifier le nouveau schéma SRST via l'utilisation de plusieurs lois d'évaporation. Cette étude numérique porte sur l'évolution d'une distribution polydisperse régulière, notée $L$. La méthode TSM-MF basée sur des fonctions de forme affines introduites dans §5.1.2 est utilisée ; nous étudions alors l'évolution des moments d'ordre 0 et 3/2 sur chaque section. La configuration numérique 0D repose sur une approche one-way coupling pour laquelle les termes intra-sectionnels ne sont pas pris en compte. Aucune phase gazeuse n'est donc considérée. Seule l'intégration des flux entre sections est évaluée. Nous utilisons ainsi la version à une étape du schéma SRST donnée dans l'Eq.(8.13). En effet, les versions RK-TVD ont été proposées uniquement pour améliorer la précision des termes sources pour la force de traînée et l'échange de chaleur. La validation de ces termes d'échange est proposée dans le cadre de calculs 1D d'acoustique diphasique dans §9.2.3 et pour des calculs sur des configurations MPS dans §12.

#### 8.3.1.1 Etude analytique de l'évaporation des distributions polydisperses continues

Dans un premier temps, Nous testons le schéma en utilisant une loi d'évaporation constante ou loi du $d^2$ telle que : $\mathrm{K}(S) = cst$. Une solution analytique $L(t,S)$ peut être établie à partir de la distribution initiale $L^0(S) = L(0,S)$. Il s'agit dans ce cas d'une translation de $L^0$ dans l'espace des tailles à une vitesse constante K :

$$L(t,S) = L^0(S + \mathrm{K}t) \tag{8.25}$$

Dans un second temps, nous évaluons la flexibilité du schéma pour des lois d'évaporation plus représentatives de phénomènes physiques. Le taux d'évolution K présente de nombreuses dépendances, notamment en fonction de la taille, de la vitesse et de la température des gouttes et des conditions de la phase gazeuse environnante. Nous proposons ici une loi d'évaporation qui est fonction de la taille des gouttes. Une solution analytique décrivant l'évolution de la NDF pour une loi d'évaporation basée sur une fonction racine carré est envisageable pour des distributions continues et régulières. Cette solution a été établie dans [Massot et al., 2010a] et s'écrit :

$$L(t,S) = L^0(\Phi(t;0,S))\frac{\mathrm{K}(\Phi(t;0,S))}{\mathrm{K}(S)} \tag{8.26}$$

où $\Phi(t;0,S)$ est la solution à l'instant $t$ de l'Eq : $\mathrm{d}_t\Phi = \mathrm{K}(\Phi)$ avec $\Phi(0) = S$. La loi d'évolution racine carré est définie par : $\mathrm{K}(S) = \sqrt{\mathrm{a}_{max} + S/S_{max}}$ où $a_{max}$ et $S_{max}$ sont des constantes. La solution s'exprime finalement de la manière suivante :

$$\Phi(t;0,S) = S_{max}\left(\left(\frac{t}{2S_{max}} - \sqrt{\mathrm{a}_{max} + \frac{S}{S_{max}}}\right) - \mathrm{a}_{max}\right) \tag{8.27}$$

Dans notre étude, nous considérons une distribution initiale continue basée sur une fonction lognormale fonction de la surface $S$, notée $L_s$, que nous définissons sur l'intervalle fini $S \in [\,0\,;\,S_{max}\,]$ :

$$L_s(S) = \frac{N_{tot}}{S\ln(\sigma_{ln})\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{(\ln S - \ln(\mu_{ln}))}{\ln(\sigma_{ln})}\right)^2\right) \tag{8.28}$$

où $N_{tot}$ représente la concentration en nombre totale. On définit aussi la concentration massique totale de la distribution $M_{tot}$ par :

$$M_{tot} = \frac{N_{tot}\,\rho_l}{6\sqrt{\pi}} \int_0^{S_{max}} S^{3/2}\, L_s(S)\,\mathrm{d}S \tag{8.29}$$

A partir de la NDF initiale $L_s$, nous procédons à la discrétisation MF de l'espace des tailles et nous déterminons de manière exacte pour chaque section les moments d'ordre 0 et 3/2 par :

$$n^{(k)} = \int_{S_{k-1}}^{S_k} L_s(S)\,\mathrm{d}S \quad ; \quad m^{(k)} = \frac{\rho_l}{6\sqrt{\pi}} \int_{S_{k-1}}^{S_k} S^{3/2}\, L_s(S)\,\mathrm{d}S \tag{8.30}$$

Nous comparons ensuite l'évolution des moments obtenus avec le schéma à ceux déterminés à partir des solutions analytiques fournis par les Eq.(8.25)&(8.27). Les erreurs relatives commises sur les moments de la NDF sont calculées par :

$$\epsilon_{mass} = \frac{\sum_{k=1}^{\mathrm{N_{sec}}} m^{(k)} - \sum_{k=1}^{\mathrm{N_{sec}}} m^{(k)}_{analytique}}{M_{tot}} \quad \epsilon_{nb} = \frac{\sum_{k=1}^{\mathrm{N_{sec}}} n^{(k)} - \sum_{k=1}^{\mathrm{N_{sec}}} n^{(k)}_{analytique}}{N_{tot}} \tag{8.31}$$

Pour les deux lois d'évaporation, nous utilisons la même distribution lognormale initiale. Les paramètres sont les suivants : $\sigma_{ln} = 0.3$, $\mu_{ln} = 4.13\,10^{-7}$ et $M_{tot} = 0.4\,\mathrm{kg/m^3}$. L'intervalle d'étude sur l'espace des tailles exprimé avec la variable surface est $[0; 1.10^{-6}\,\mathrm{m^2}]$. Cet intervalle, défini avec la variable rayon, est $r \approx [0; 282.95\,\mu\mathrm{m}]$ ce qui est proche d'une granulométrie rencontrée en propulsion solide.
Pour la loi d'évaporation constante, nous analysons en particulier le choix d'une discrétisation appropriée de l'espace des tailles comme cela est proposé pour la méthode OSM-MF dans [Laurent et al., 2004b]. Respectant l'Eq.(8.7), le critère $\mathrm{CFL}^{(k)}_{evap}$, calculé pour chaque section, doit être inférieur à 1 pour assurer la stabilité globale du schéma. Dans le cas très spécifique où tous les critères sont égaux à 1, la solution est exacte. Cette situation ne nous intéresse pas. Comme expliqué dans §7.1.1, nous choisissons le pas de temps de nos simulations de telle manière à résoudre les temps caractéristiques de la phase gazeuse. Ces derniers sont généralement plus rapides que les temps d'évaporation des gouttes ce qui signifie que les $\mathrm{CFL}_{evap}$ sont des valeurs très inférieures à 1. Nous nous intéressons alors à l'impact de ces faibles valeurs sur la qualité de la solution numérique en fixant la discrétisation sectionnelle et en faisant varier le pas de temps. Dans un second temps, nous fixons le pas de temps temps et procédons à une étude de convergence sur le nombre de sections. Dans le cas de la loi d'évaporation racine carré, nous effectuons la même démarche.

#### 8.3.1.2 Loi d'évaporation constante

Nous choisissons $\mathrm{K} = 1.10^{-4}\,\mathrm{m^2/s}$ et un temps de simulation égal à $1.5\,10^{-4}$s. Les simulations sont réalisées avec deux stratégies de discrétisation de l'espace des tailles : une approche reposant sur des sections $\Delta S = cst$ et une discrétisation avec un intervalle $\Delta r$ constant. Pour chaque stratégie, nous utilisons 5 sections et nous analysons la solution pour trois pas de temps : $\Delta t_1 = 2.10^{-4}$s, $\Delta t_2 = 2.10^{-5}$s et $\Delta t_3 = 2.10^{-7}$s. Pour l'approche $\Delta S = cst$, les critères $\mathrm{CFL}_{evap}$ des sections sont respectivement : $\mathrm{CFL}_{evap} = 0.1$, $\mathrm{CFL}_{evap} = 0.01$ et $\mathrm{CFL}_{evap} = 1.10^{-4}$.
Les résultats obtenus pour les deux stratégies sont fournis dans les Fig.(8.6)&(8.7). La discrétisation $\Delta r = cst$ offre une précision plus élevée pour les concentrations en nombre et en masse. Cela est particulièrement marqué sur l'évolution du moment d'ordre 0 où l'erreur, pour la configuration $\Delta t_2$, est d'environ 4% pour l'approche $\Delta r = cst$ alors qu'elle est de 7% pour des intervalles à $\Delta S$ constant. L'avantage de la stratégie à rayon constant repose essentiellement sur le fait que la discrétisation est plus fine pour les petites gouttes. Ceci sera rediscuté dans l'étude avec la loi racine carré.
Comme attendu, les erreurs sur les deux moments augmentent quand le pas de temps diminue c'est-à-dire pour des valeurs $\mathrm{CFL}_{evap}$ faibles. Néanmoins, nous observons une saturation des erreurs, notamment pour les cas $\Delta t_2$ et $\Delta t_3$, ce qui signifie que le schéma semble bien converger vers une

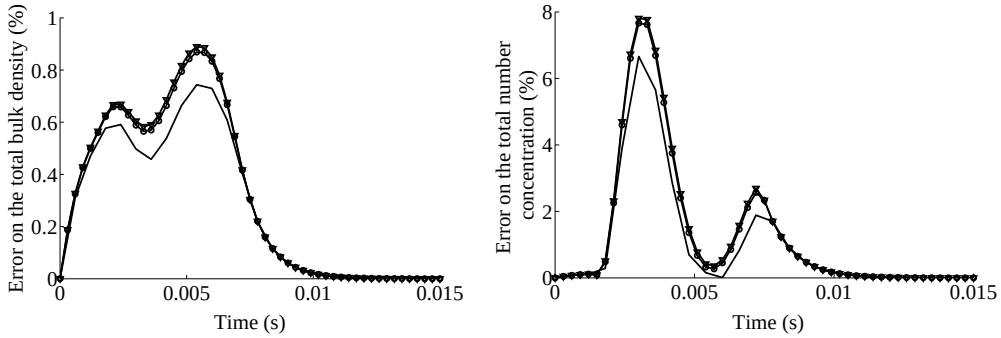


**FIGURE 8.6** – *Evolution temporelle des erreurs sur les concentrations totales en nombre et en masse rapportées à leurs valeurs initiales. Configuration avec 5 sections et une discrétisation $\Delta S$ constante : —- :* $\Delta t_1 = 2.10^{-4}$s ou CFL $= 0.1$ *∘–∘ :* $\Delta t_2 = 2.10^{-5}$s ou CFL $= 0.01$ *▽–▽ :* $\Delta t_3 = 2.10^{-7}$s ou CFL $= 1.10^{-4}$

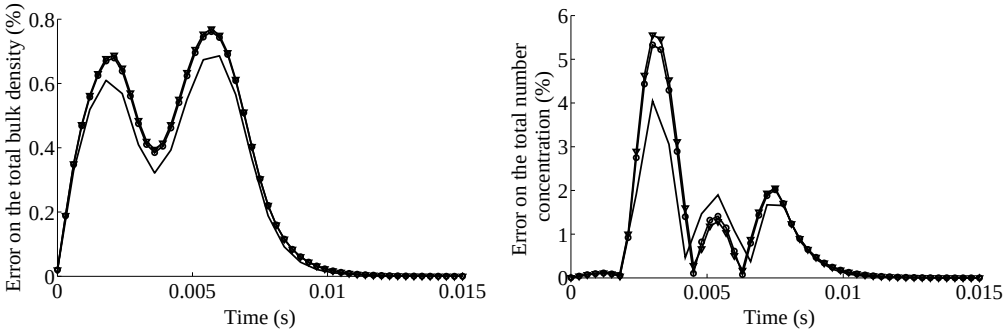


**FIGURE 8.7** – *Evolution temporelle des erreurs sur les concentrations totales en nombre et en masse rapportées à leurs valeurs initiales. Configuration avec 5 sections et une discrétisation $\Delta r$ constante : —- :* $\Delta t_1 = 2.10^{-4}$s *∘–∘ :* $\Delta t_2 = 2.10^{-5}$s *▽–▽ :* $\Delta t_3 = 2.10^{-7}$s

solution quand le pas de temps tend vers 0. Pour nous en assurer, des calculs ont été réalisés avec des pas de temps inférieurs, cette conclusion est bien confirmée.
Dans cette étude, nous constatons que les erreurs sont acceptables pour un nombre de sections raisonnable ce qui est un objectif à atteindre pour de futures simulations industrielles. En effet, pour le cas le plus défavorable i.e. la configuration $\Delta t_3$, l'erreur sur la concentration massique n'excède pas 1% et celle sur le nombre est inférieure à 8%.

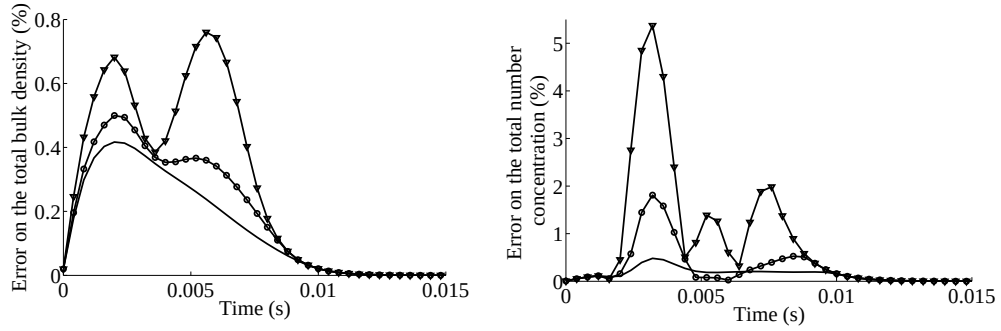


**FIGURE 8.8** – *Evolution temporelle des erreurs sur les concentrations totales en nombre et en masse rapportées à leurs valeurs initiales. Configuration avec une discrétisation $\Delta r$ constante et $\Delta t_2 = 2.10^{-5} s$ : ▽–▽ : 5 sections ; ∘–∘ 10 sections ; —- : 20 sections*

Nous réalisons trois autres calculs avec 5, 10 et 20 sections. Nous choisissons une discrétisation $\Delta r = cst$ car elle s'avère être la meilleure stratégie pour notre cas d'étude. Nous utilisons le pas de temps $\Delta t_2$ pour lequel le schéma est déjà convergé. Comme présenté dans la Fig.(8.8), nous obtenons naturellement de meilleurs résultats, en particulier sur la concentration en nombre, quand le nombre de sections augmente. L'erreur sur le moment d'ordre 0 est inférieure à 0.5% avec 20 sections ; les mêmes niveaux d'erreur sont obtenus sur la concentration massique.

En conclusion préliminaire, le nouveau schéma fournit des résultats satisfaisants même pour des pas de temps très faibles qui correspondent à de faibles valeurs de $\mathrm{CFL}_{\mathrm{evap}}$. De plus, l'usage d'un grand nombre de sections améliore significativement la précision en réduisant la diffusion numérique dans l'espace des tailles. Nous avons aussi observé une amélioration des résultats avec la discrétisation $\Delta r = cst$.

#### 8.3.1.3 Loi d'évaporation racine carré

Nous choisissons $\mathrm{a}_{max} = 1.10^{-8}$ et $S_{max} = 0.6$ ; nous définissons des taux d'évolution moyens pour toutes les sections par :

$$K^{(k)} = \frac{\displaystyle\int_{S_{k-1}}^{S_k} \sqrt{\mathrm{a} + S/S_{max}}\,\mathrm{d}S}{(S_k - S_{k-1})} \tag{8.32}$$

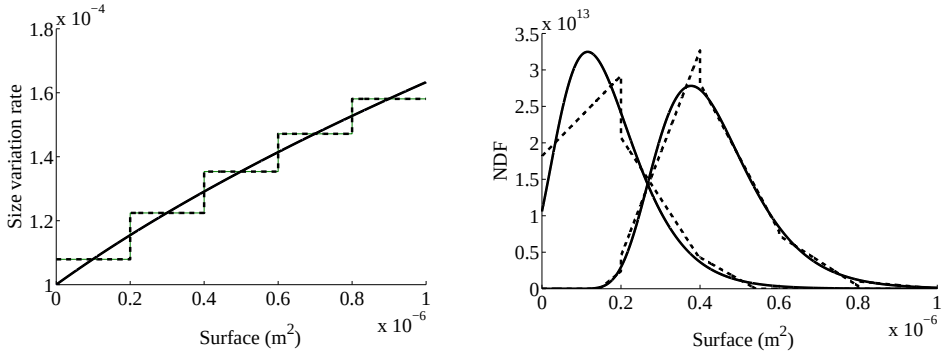


**FIGURE 8.9** – *Gauche : Discrétisation de la loi racine carré avec 5 sections et une discrétisation $\Delta S$ constante / Droite : Tracé de la NDF à $t = 0s$ et à $t = 2.210^{-3}s$ pour la reconstruction affine : Ligne discontinue ; Solution analytique : Ligne continue*

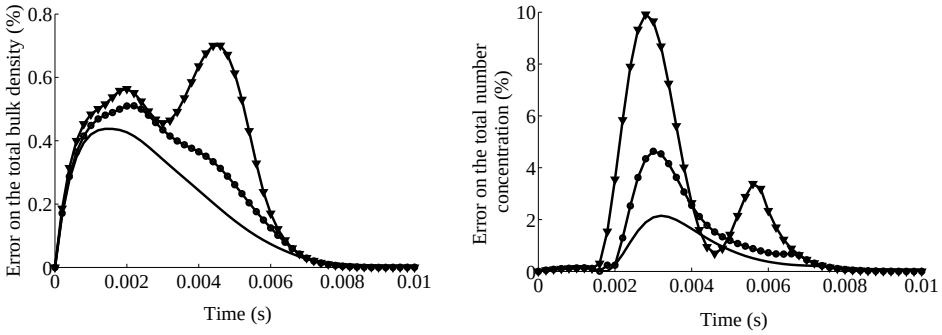


**FIGURE 8.10** – *Evolution temporelle des erreurs sur les concentrations totales en nombre et en masse rapportées à leurs valeurs initiales. Configuration avec une discrétisation $\Delta S$ constante et $\Delta t = 2.10^{-5}s$ : ▽–▽ : 5 sections ; ○–○ 10 sections ; —- : 20 sections*

Pour les deux stratégies de discrétisation des tailles, nous réalisons plusieurs simulations en utilisant le même pas de temps $\Delta t = 2.10^{-5}$s et différents nombres de sections à savoir 5, 10 et 20 sections. Premièrement, nous souhaitons valider le fait de prendre des taux d'évaporation constants par section.

Pour les Fig.(8.9)&(8.11), les taux d'évolution entre la section des plus petites gouttes et celle des plus grosses se caractérisent par un rapport : $\mathrm{K_{max}/K_{min}} > 1.5$ ce qui est une valeur élevée et offre une configuration contraignante pour valider le schéma SRST.

Les gouttes de plus grandes tailles s'évaporant plus rapidement que les petites, l'écart-type de la distribution lognormale diminue au cours du temps. Quelle que soit la discrétisation sectionnelle, le schéma restitue avec fidélité l'évolution temporelle de la NDF ce qui démontre que la méthode est adaptée aux lois d'évaporation avancées.

En comparant les Fig.(8.10)&(8.12), nous confirmons que la discrétisation à $\Delta r$ constant offre de meilleurs résultats sur les moments par rapport à la stratégie $\Delta S = cst$. Cela est confirmé visuellement en comparant les reconstructions affines aux solutions analytiques de la NDF à $t =$

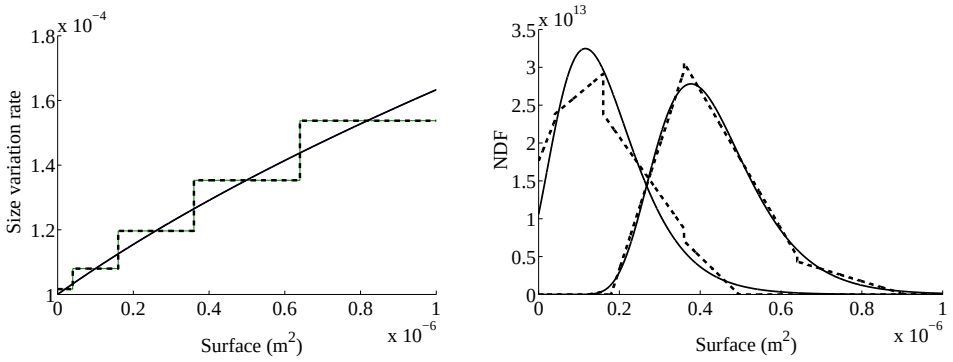


**FIGURE 8.11** – *Gauche : Discrétisation de la loi racine carré avec 5 sections et une discrétisation $\Delta r$ constante / Droite : Tracé de la NDF à $t = 0s$ et à $t = 2.210^{-3}s$ pour la reconstruction affine : Ligne discontinue ; Solution analytique : Ligne continue*

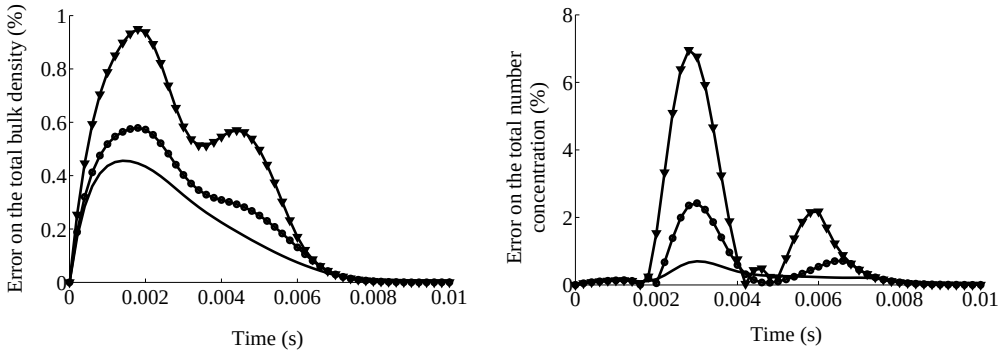


**FIGURE 8.12** – *Evolution temporelle des erreurs sur les concentrations totales en nombre et en masse rapportées à leurs valeurs initiales. Configuration avec une discrétisation $\Delta r$ constante et $\Delta t = 2.10^{-5}s$ : ▽–▽ : 5 sections ; ○–○ 10 sections ; —- : 20 sections*

$2.2\,10^{-3}$s fournies en Fig.(8.9)&(8.11). Ces représentations illustrent qu'un raffinement en sections plus fin au niveau des plus petites tailles de gouttes est à privilégier. En effet, avec l'approche $\Delta r = cst$, la NDF est mieux discrétisée sur l'intervalle $[0; 2.10^{-7}\,\mathrm{m}^2]$ avec 2 sections alors qu'une seule n'est utilisée pour l'autre stratégie de discrétisation. De plus, la loi d'évaporation racine est mieux décrite. En effet, le taux d'évaporation est surestimé pour la première section avec une approche $\Delta S = cst$. De manière plus globale, on en conclut que la discrétisation sectionnelle doit être plus fine pour les gammes de tailles présentant de fortes variations de leur taux d'évaporation. La seconde analyse, portant sur l'influence du nombre de sections, valide une diminution des erreurs sur les concentrations en nombre et en masse qui sont de l'ordre de 0.5% quand 20 sections sont utilisées. Les résultats sont également satisfaisants avec 5 sections car l'erreur sur le moment d'ordre 3/2 est inférieure à 0.5%. L'erreur sur la concentration en nombre est plus importante et avoisine 10% pour la discrétisation $\Delta S = cst$. Le pic d'erreurs est observé au passage du maximum de la NDF en $S = 0$ ce qui explique à nouveau qu'une discrétisation appropriée améliore nettement la dynamique d'évaporation des petites gouttes.

### 8.3.2 Vérification du schéma cinétique SKE

L'étude du schéma SKE reprend les mêmes étapes de validation que celles de la méthode SRST à savoir une approche 0D et un suivi temporel des concentrations en nombre et en masse par rapport aux solutions analytiques obtenues à partir des lois d'évaporation constante et racine carré. Cependant, nous proposons une vérification plus succincte que celle du schéma SRST en ne prenant en compte qu'une configuration numérique par loi d'évaporation. Le schéma SKE et les résultats présentés par la suite ont été proposés en début de thèse. La reconstruction affine pour la méthode TSM-MF n'avait pas encore été proposée, cette étude est donc réalisée avec l'approche exponentielle détaillée dans §5.1.1.

#### 8.3.2.1 Loi d'évaporation constante

Pour la distribution initiale, nous prenons à nouveau une fonction lognormale $L_s$, donnée en Eq.(8.28), que nous étudions sur l'intervalle fini $r \in [0\,;45\,\mu\text{m}]$. Les paramètres de la distribution sont : $\sigma_{LN} = 0.3$, $\mu_{LN} = 3.77\,10^{-10}$ et $M_{tot} = 0.4\,\text{kg/m}^3$. L'espace des tailles est découpé via 10 sections et la stratégie de discrétisation utilise une approche $\Delta S = cst$. Pour la loi d'évaporation, le critère $\text{CFL}_{\text{evap}}$ est donc le même dans toutes les sections.
Une étude préliminaire montre que le schéma SKE donne la solution exacte du transport de la fonction de distribution quand le critère $\text{CFL}_{\text{evap}} = 1$. Cette conclusion est valable quelle que soit la discrétisation de l'espace des tailles (stratégie et nombre de sections) et la valeur du pas de temps.
Nous posons $\text{K} = 1.10^{-6}$ et nous choisissons le pas de temps de manière à obtenir $\text{CFL}_{\text{evap}} = 2.10^{-3}$ ce qui est une valeur suffisamment faible pour observer la diffusion numérique de la solution dans l'espace des tailles.

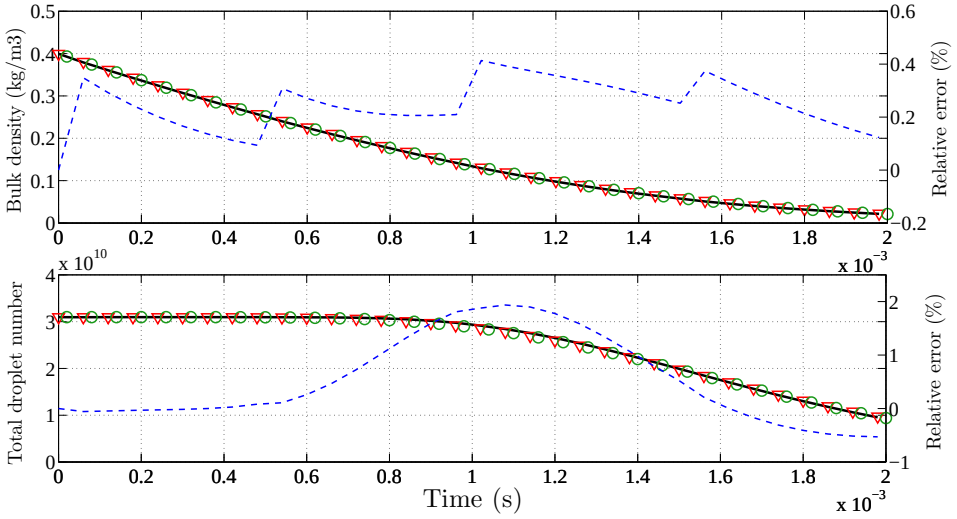


**FIGURE 8.13** – *Evolutions temporelles des concentrations en masse (en haut) et en nombre (en bas) ; Résultats CEDRE : ○, SAP1 : ▽, erreurs avec SAP1 :- -, Solution analytique :**Ligne continue***

L'évolution temporelle des concentrations en nombre et en masse est très satisfaisante comme cela est illustré par la Fig.(8.13).
Par la suite, l'utilisation du schéma SRST a été privilégié notamment du fait de l'intégration simultanée des termes d'échanges avec le gaz. Pour autant, cela ne remet pas en cause la qualité du schéma SKE qui est adapté aux lois d'évaporation complexes. Pour la concentration massique, l'erreur ne dépasse pas 0.5% et elle est inférieure à 2% pour la concentration en nombre. Ces erreurs, pour un $\text{CFL}_{evap}$ suffisamment faible, sont du même ordre de grandeurs que celles du schéma SRST.

#### 8.3.2.2 Loi d'évaporation racine carré

Pour l'étude de la loi racine carré, nous utilisons un spectre de tailles plus étendu : $r \in [0\,;\,60\,\mu\text{m}]$. Les paramètres de la loi d'évaporation sont $\text{a} = 1.10^{-10} > 0$ et $S_{max} = 0.2$. Ainsi, le ratio entre les taux d'évaporation des plus petites et plus grosses tailles de gouttes est $\text{K}_{max}/\text{K}_{min} > 10$ ce qui est suffisamment contraignant pour valider le schéma SKE. La valeur de ce ratio est d'ailleurs plus élevée que l'étude du schéma SRST (cf.§8.3.1.3). En effet, le schéma SKE a été développé dans l'optique de traiter des lois d'évaporation présentant des variations importantes selon la taille des gouttes via une résolution précise des flux aux bornes des sections §8.2.
Dans cette étude, nous souhaitons valider le schéma sans prendre en compte l'effet de la discrétisation sectionnelle sur le calcul des taux d'évaporation. Une étude préliminaire montre que le choix de 120 sections offre une convergence suffisamment marquée. Notons que les valeurs des $\text{CFL}_{evap}^{(k)}$ entre la première et dernière section sont égales à 0.05 et à 0.66.
Comme évoqué dans §8.3.1.3, les plus petites gouttes s'évaporent plus lentement que les plus grosses, l'écart-type de la distribution lognormale diminue au cours du temps. Comme illustré en Fig.(8.14), le schéma SKE offre la bonne évolution temporelle de la NDF dans l'espace des tailles. En effet, à $t = 2.5\,10^{-5}$s, l'erreur sur la concentration massique est de 0.5% et celle sur la concentration en nombre est environ de 2.2 %. Ces erreurs sont équivalentes à celles obtenues pour

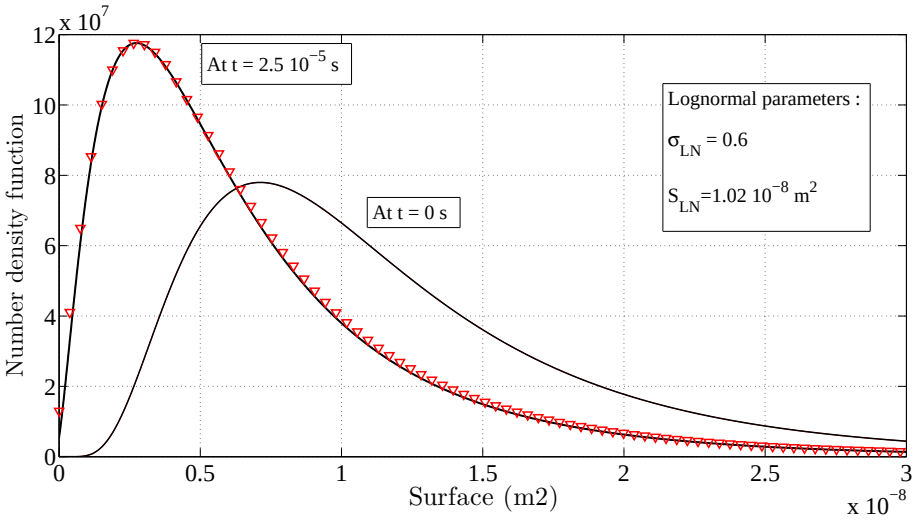


**FIGURE 8.14** – *Evolution temporelle de la NDF à t=0s et à t=*$2.5\,10^{-5}s$ */ SAP1 :* ▽*, Solution analytique :* ***Ligne continue***

la loi d'évaporation constante ce qui semble assez naturel car l'écart entre les taux d'évaporation entre deux sections successives est très faible. Ainsi, pour un très grand nombre de sections, la loi d'évaporation peut être considérée constante localement sur l'espace des tailles. Nous avons alors réalisé une seconde simulation numérique en utilisant quatre sections et une valeur $\mathrm{CFL}_{evap}$ pour la dernière section égale à 0.24. L'erreur sur la concentration massique est environ égale à 1% ce qui est une valeur très satisfaisante pour une mise en données adaptée aux contraintes d'un calcul industriel. Le schéma SKE est donc validé pour des lois d'évaporation complexes présentant de fortes variations mais qui restent continues.

### 8.3.3 Evaluation qualitative de la combustion des gouttes bicomposants avec la méthode MF bicomposant et son schéma SRST

Nous avons validé dans §8.3.1 le schéma SRST, et plus particulièrement l'intégration des flux entre sections pour la méthode TSM-MF. Les configurations 0D proposées ne prenaient pas en compte les interactions avec une phase gazeuse. Nous proposons d'étudier un cas de combustion de gouttes d'$Al/Al_2O_3$ pour lequel nous allons vérifié que l'apport d'énergie à la phase gazeuse est correct et donc que les termes intra-sectionnels pour l'échange de masse et de chaleur sont bien intégrés. Les gouttes sont ici en équilibre dynamique avec le gaz.
Les résultats présentés constituent une analyse qualitative préliminaire en vue de futurs calculs de combustion diphasique avec les nouvelles méthodes numériques développées dans cette thèse. A cette occasion, nous employons le modèle MF bicomposant introduit dans §6.2 ainsi que son schéma SRST bicomposant présenté dans §8.1.3.
Le modèle de combustion utilisé est le modèle ASSM présenté dans §2.4.1.2, la phase gazeuse est composée d'une seule espèce, notée PC. Nous nous intéressons à l'étude de la dynamique de la combustion. Pour se faire, nous comparons les temps de combustion selon que la surface de la goutte échange avec le gaz ou que la présence de la calotte d'alumine occulte une partie de cette surface. Nous utilisons le modèle de calotte sphérique introduit dans §2.3.3 ; un terme correctif $S_{al}/S$ pondère le terme de transfert de masse $\dot{m}_p$, il tend à diminuer le débit d'aluminium évaporé au fur et à mesure que la proportion d'alumine dans la goutte augmente. Aucune condensation d'alumine n'est considérée dans cette étude, la quantité d'alumine initiale au sein des gouttes reste constante au cours du calcul.

**TABLE 8.1** – *Conditions initiales et propriétés thermodynamiques*

| Propriétés | Valeurs | Propriétés | Valeurs |
|---|---|---|---|
| $T_{g,0}$ | 3000 K | $T_{sat} = T_{p,0}$ | 2790 K |
| $\rho_{g,0}$ | 3.78 kg/m$^3$ | $Q_r$ | $9.5\,10^6$ J/kg |
| $m_{tot}$ | 0.5 | $Y_{ox}$ | 0.05 |

Nous étudions deux distributions de gouttes bicomposants : une monodisperse et une tridisperse. Les conditions initiales et les propriétés thermodynamiques pour le gaz et les gouttes sont fournies

**TABLE 8.2** – *Discrétisation MF bicomposant de l'espace des masses*

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| Polydisperse (6 sections) | | | | |
| $m_{ox}$ (kg) | 0.0 | $1.9\,10^{-11}$ | $1.59\,10^{-10}$ | |
| $m_{al}$ (kg) | 0.0 | $1.1\,10^{-10}$ | $8.96\,10^{-10}$ | $3.026\,10^{-9}$ |
| Monodisperse (1 section) | | | | |
| $m_{ox}$ (kg) | 0.0 | $1.59\,10^{-10}$ | | |
| $m_{al}$ (kg) | 0.0 | $3.03\,10^{-9}$ | | |

dans Tab.(8.1). Nous choisissons pour les deux granulométries la même fraction massique d'alumine initiale. La discrétisation sectionnelle de l'espace des masses et les distributions initales sont respectivement données en Tab.(8.2)&(8.3). Pour le cas monodisperse, une seule section 2D est utilisée ce qui assure une validation très simple des termes d'échange avec le gaz et des flux sortant de la section en $m_{al} = 0$. La configuration polydisperse se compose de 3 sections dans l'espace de la masse d'aluminium et de 2 pour celle de l'alumine ce qui correspond à une discrétisation de l'espace des masses avec 6 sections 2D. Ce cas test vérifie l'intégration des flux de masse et de chaleur entre les sections. Aucune phase de chauffage n'est considérée, les gouttes ont déjà atteint leur température de saturation fixée ici à $T_{sat} = 2790$K . Pour ces deux simulations, le pas de temps est égal à $1.10^{-6}$s.

**TABLE 8.3** – *Données sur les distributions en masse*

| Distribution | Diamètre initial ($\mu$m) | Concentration (kg/m$^3$) | N° des sections ($m_{al}$,$m_{ox}$) |
|---|---|---|---|
| Polydisperse | 41.53 | 0.167 | (1,1) |
| | 86.39 | 0.167 | (2,2) |
| | 135.85 | 0.167 | (3,2) |
| Monodisperse | 126.21 | 0.5 | (1,1) |

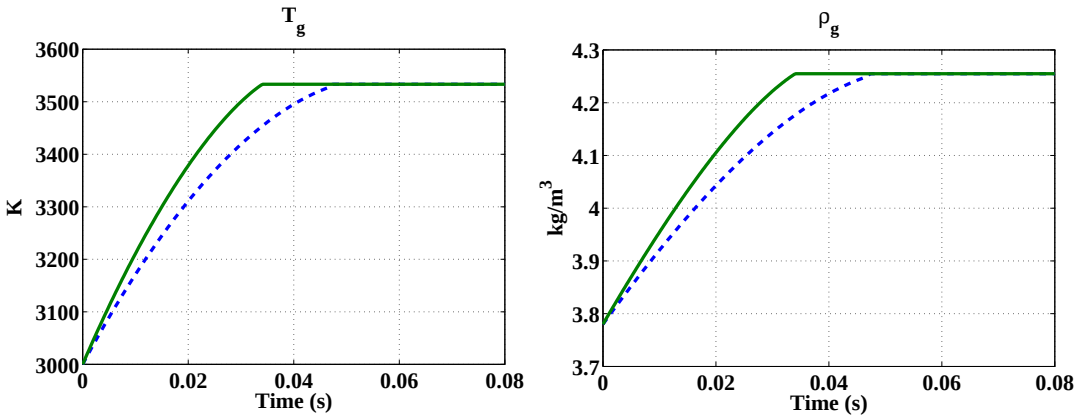


**FIGURE 8.15** – *Evolutions temporelles de la température et de la densité locale du gaz pour la configuration monodisperse — : sans modèle de calotte, – – : avec modèle de calotte*

Les Fig.(8.15)&(8.17) illustrent les évolutions temporelles de la température et de la densité locale du gaz. Nous nous assurons que la température de fin de combustion est la même pour les deux simulations car la quantité d'aluminium initiale est équivalente pour les deux distributions. Nous obtenons dans les deux cas 3533K ce qui correspond exactement à l'élévation de température prévue par un bilan thermodynamique prenant en compte la concentration massique d'aluminium et la température initiale du gaz. Il y a conservation de la masse et de l'énergie du système diphasique ; ce point valide l'intégration des termes d'échange de masse entre phases mais aussi les flux entre sections pour la configuration polydisperse. Notons que la concentration massique de la phase dispersée en fin de combustion correspond bien à celle de l'alumine initialement présente au sein des gouttes à savoir 0.25kg/m$^3$.
Pour la distribution monodisperse, il est intéressant d'étudier l'évolution temporelle de la surface totale des gouttes au cours de la combustion. Le modèle MF bicomposant repose sur le suivi des masses des composants de la goutte à la différence des méthodes MF classiques qui sont conditionnées par la surface, la taille n'est donc qu'une variable dérivée. Dans la Fig.(8.16), le comportement attendu pour le modèle ASSM correspond bien à une décroissance linéaire de la surface au cours

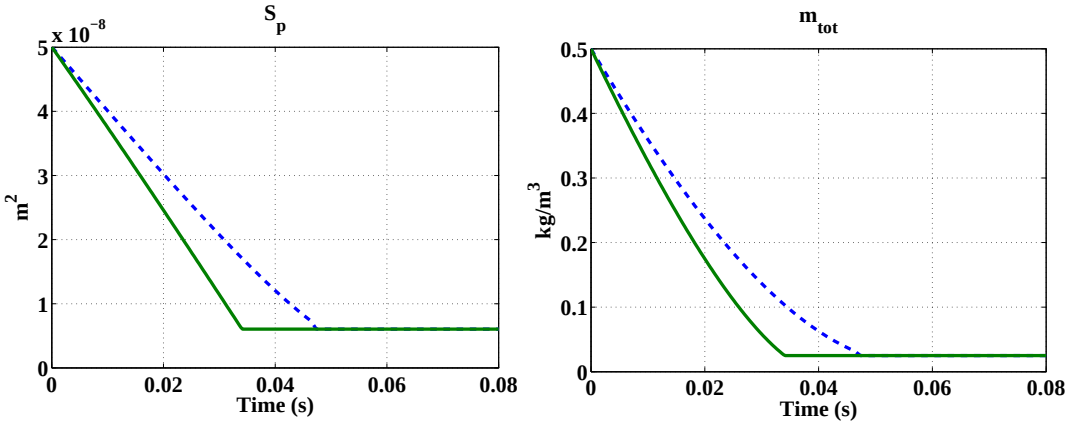


**FIGURE 8.16** – *Evolutions temporelles de la surface des gouttes et de la concentration massique totale du spray pour la configuration monodisperse — : sans modèle de calotte, – – : avec modèle de calotte*

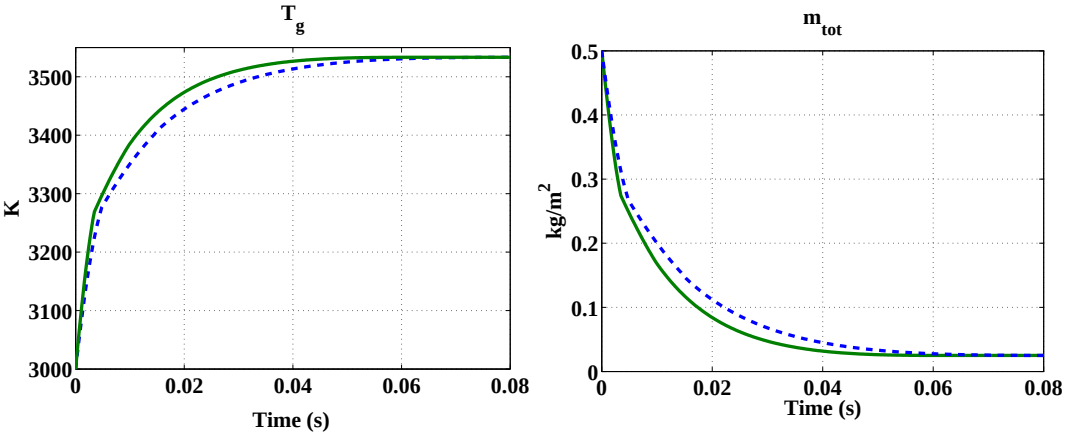


**FIGURE 8.17** – *Evolutions temporelles de la température du gaz et de la concentration massique totale du spray pour la configuration polydisperse — : sans modèle de calotte, – – : avec modèle de calotte*

du temps. La prise en compte du lobe d'alumine a pour conséquence une augmentation du temps de combustion d'environ 30% ce qui est une observation importante ; la surface de la goutte décroît toujours de manière linéaire, seul le taux d'évolution de la taille est modifié. Pour de futures études d'instabilités de fonctionnement, une modification de l'épaisseur de la zone de combustion distribuée est un paramètre influent. En effet, le dégagement d'énergie ne se situe pas dans la même région de la chambre et l'interaction entre la phase dispersée et phase gazeuse s'en trouve alors significativement changée. Cette étude renforce l'idée qu'une méthode adaptée pour décrire des gouttes bicomposants ainsi qu'une modélisation fine de la combustion à l'échelle de la goutte sont capitales pour des simulations diphasiques réactives en conditions moteur.
Pour la configuration tridisperse, l'évolution de la température du gaz et de la concentration massique des gouttes donnée en Fig.(8.17) présente une dynamique différente de celle rencontrée dans le cas monodisperse. En effet, elle apparaît comme une combinaison de la combustion de plusieurs tailles de gouttes. On retrouve cependant un comportement linéaire en tout début de combustion i.e. $t \in [0; 0.005\text{s}]$ qui correspond à la combustion des plus petites gouttes. La configuration polydisperse met en évidence que pour des temps de combustion équivalents, le changement de granulométrie de la phase condensée impacte significativement le profil thermique au sein de la zone de combustion distribuée. Une étude plus détaillée reliant la polydispersion à la dynamique de la combustion et des échanges entre phases est proposée dans §11.
Finalement, cette étude préliminaire révèle le potentiel de la méthode MF bicomposant à décrire la combustion de gouttes sur un critère naturel à savoir la consommation de l'aluminium.

## Conclusion du chapitre 8

Nous avons dérivé deux familles de schémas dédiés au traitement des flux entre sections et au couplage avec le gaz. La première repose sur un calcul de ces flux basé sur le seul respect des

conditions de réalisabilité sur les moments. La seconde famille est celle des schémas cinétiques qui repose sur le suivi de la NDF régit par l'équation cinétique réduite à un problème d'advection dans l'espace des tailles.
Ces deux schémas conviennent à des lois d'évaporation complexes i.e. dont le taux d'évaporation est fonction de la taille des gouttes et de la vitesse relative de l'écoulement autour de ces dernières ; autant de paramètres décrits par des modèles d'évaporation ou de combustion représentatifs. Nous mettons l'accent sur l'avantage du schéma SRST qui est d'intégrer, au sein du même pas de temps, la force de traînée et le terme de chauffage.
Les validations 0D ont souligné la précision atteinte par les deux schémas pour décrire l'évolution des moments en taille. Cela a été confirmé, même pour des pas de temps très faibles conduisant à une diffusion finalement limitée de la solution numérique dans l'espace des tailles. Nos études numériques ont également mis en évidence qu'une discrétisation sectionnelle basée sur une stratégie $\Delta r = cst$ est pertinente. En effet, cette dernière implique un raffinement en sections plus important pour les plus petites gouttes ce qui a pour conséquence de réduire l'erreur commise sur l'évolution de la concentration en nombre. Nous avons finalement validé le principe du schéma SRST étendu au cas bicomposant via un modèle MF basé sur les moments d'ordre 0 et 1.
Dans le chapitre suivant, nous proposons d'étendre la validation du schéma SRST au travers de simulations 1D d'acoustique diphasique polydisperse. Notons que ces simulations sont consacrées à l'évaluation de la stratégie de splitting introduite dans le chapitre 7. D'autres validations du schéma SRST sont également proposées dans le chapitre 12 dans le cadre de simulations 2D sur des configurations moteur complexes et pour des modèles d'évaporation et de combustion présentés dans la Partie I.

# Chapitre 9

# Etudes numériques d'acoustique diphasique avec le code SAP1

*Dans ce chapitre, nous établissons une hiérarchie de cas tests basée sur l'étude d'une onde acoustique plane dans un milieu diphasique inerte ou évaporant. Du point de vue de la simulation, les interactions spray-acoustique sont particulièrement complexes à restituer car les méthodes et la stratégie de couplage employées doivent conduire à un niveau élevé de précision pour d'une part propager fidèlement les perturbations acoustiques, et d'autre part rendre compte des échanges entre les phases. La première partie de ce chapitre est consacrée à l'évaluation de la stratégie de splitting présentée dans le chapitre 7 dans un contexte d'acoustique linéaire. Cela nous permet de comparer nos solutions à des relations de dispersion pour différents cas : 1- pour les sprays monodisperses ou polydisperses 2- pour des gouttes inertes ou en évaporation 3- pour des gouttes monocomposantes ou bicomposantes. Chaque configuration étudiée vérifie également le schéma SRST pour l'intégration des termes sources dans un cadre monodimensionnel ce qui complète les analyses faites en 0D dans le chapitre 8. Les cas tests sont réalisés avec le code de recherches SAP1 spécifiquement dédié aux études d'acoustique polydisperse et à la validation des méthodes ou des stratégies numériques pour les approches diphasiques Euler-Euler. Il constitue un outil essentiel pour évaluer de nouveaux développements avant qu'ils ne soient intégrés dans des codes industriels comme le code CEDRE présenté dans le chapitre 10. Ici, l'accent est mis sur l'analyse de la technique de splitting pour déterminer l'influence du pas de temps par rapport aux échelles de temps caractéristiques du problème. Dans la seconde partie du chapitre, nous proposons une analyse mathématique de l'erreur de splitting pour des systèmes linéaires. Nous nous intéressons en particulier aux problèmes raides ce qui signifie ici une situation où les temps de relaxation des particules sont très rapides, plus précisément pour des nombres de Stokes tendant vers 0. Nous caractérisons ainsi le comportement des méthodes de splitting de Lie et de Strang quand le pas de temps est plus grand que les temps de relaxation les plus rapides.*

## 9.1 Développement du code de recherches SAP1

### 9.1.1 Objectifs et contexte d'étude

Le code de recherches SAP1 (Simulation d'Acoustique Polydisperse 1D) est un solveur diphasique 1D décrivant une phase condensée polydisperse et réactive fortement couplée à une phase gazeuse monoespèce, compressible et instationnaire. Les configurations numériques sont établies sur des maillages fixes composés d'une unique rangée de cellules de même taille. Cette taille est déterminée lors de la mise en données de manière à fournir la discrétisation spatiale appropriée au phénomène étudié. L'objectif de ce code est triple :

– Etudier et valider les nouvelles méthodes eulériennes décrivant un spray polydisperse.

– Tester et évaluer les stratégies de couplage entre phases basées sur des méthodes de splitting d'opérateurs.

– Permettre l'étude de schémas numériques au sein de modules isolés.

Nous avons choisi une stratégie de splitting séparant les transports des phases gazeuse et dispersée et le traitement des termes sources qui assure le couplage fort entre les phases. Dans le cadre de ces études d'acoustique, nous étudions le splitting à deux étages introduit dans §7.1.4.2. Des méthodes d'ordre élevé ont été implémentées pour la résolution de chacun des opérateurs ; elles sont présentées par la suite. Ces schémas allient robustesse et précision et le pas de temps de chaque opérateur est déterminé de manière à offrir la résolution la plus appropriée pour le problème considéré. Les erreurs numériques pour le traitement de chaque sous-système sont donc faibles. Pour un grand nombre de cas, l'erreur de splitting est donc majoritaire ce qui nous permet de l'évaluer qualitativement et d'illustrer les conséquences d'un pas de temps trop grand par rapport aux temps caractéristiques du système diphasique.

## 9.1.2 Structure globale du code

### 9.1.2.1 Méthodes eulériennes pour la description des phases

Nos travaux sont consacrés à une description eulérienne totale de l'écoulement diphasique qui est particulièrement adaptée pour le couplage fort entre phases (cf. §4.1.1.3). Le gaz est décrit avec les équations d'Euler. Plusieurs approches eulériennes ont été implémentées pour la phase dispersée :

– La méthode Multi-Classe (cf. §4.1.3)

– Les méthodes MF à un et deux moments en taille : OSM (cf. §4.2.2.1) et TSM-affine (cf. §5.1.2)

– La méthode MF bicomposante (cf. §6.2)

Pour les méthodes MF, trois stratégies de discrétisation de l'espace des tailles ont été adoptées : Un découpage en sections 1- à $\Delta r$ constant 2- à $\Delta m$ constant 3- à $\Delta S$ constant.

### 9.1.2.2 Discussion sur le choix du pas de temps de splitting

Pour la technique de splitting à deux étages présentée dans §7.1.4.2, nous établissons une stratégie dédiée pour le choix des pas de temps pour la convection de la phase liquide $\Delta t_c$ et pour le traitement de l'opérateur acoustique $\Delta t_a$. Le premier est déterminé de manière à minimiser l'erreur introduite par le schéma de transport en retenant un critère $\mathrm{CFL}_{conv}$ aussi proche que possible de 1. Le pas de temps $\Delta t_a$ est calculé afin d'assurer à la fois un couplage pertinent entre les phases et un pas de temps suffisamment grand pour optimiser le coût calcul. Dans cette optique, nous cherchons le temps caractéristique le plus lent entre l'acoustique de la phase gazeuse et les temps de relaxation des gouttes :

$$\Delta t_a = \max\{K_p \tau_{min}; K_g \tau_g\} \tag{9.1}$$

où $K_g$ et $K_p$ sont des coefficients de sécurité. Quand $\tau_{min} > \tau_g$, nous pilotons un pas de temps $\Delta t_a$ en fonction de la taille des gouttes comme illustré dans la Fig.(9.1) avec une valeur raisonnable de $K_g$. Il n'est pas nécessaire de contraindre le pas de temps $\Delta t_a$ car un pas de temps interne à l'opérateur de transport du gaz peut être retenu afin de remplir les conditions de stabilité du schéma associé. Nous posons toutefois une limite supérieure qui est imposée par la période de l'onde $\tau_\omega$. En effet, le couplage avec la phase dispersée doit être réalisé assez souvent pour capter les fluctuations de la phase gazeuse. L'opérateur des termes sources est appelé de manière à avoir un nombre minimal d'instants de couplage avec l'onde acoustique :

$$\Delta t_a < \frac{\tau_\omega}{4} \tag{9.2}$$

Quand $\tau_{min} < \tau_g$, nous ne souhaitons pas être contraint par les temps caractéristiques des plus petites gouttes comme expliqué dans §7.1.1. Le pas de temps $\Delta t_a$ est donc relativement grand par rapport à ces échelles temporelles de la phase dispersée mais il garantit d'introduire un minimum de diffusion numérique lors la résolution de la phase gazeuse pour une valeur suffisamment grande de $K_g$. Dans les études suivantes, nous étudions les conséquences sur la solution numérique d'un pas de temps plus grand que les temps caractéristiques des gouttes.

### 9.1.2.3 Schémas numériques pour les différents opérateurs

La discrétisation spatiale adopte une formulation Volumes Finis pour le transport dans l'espace physique des deux phases. Le couplage est une résolution locale pour chaque cellule du maillage

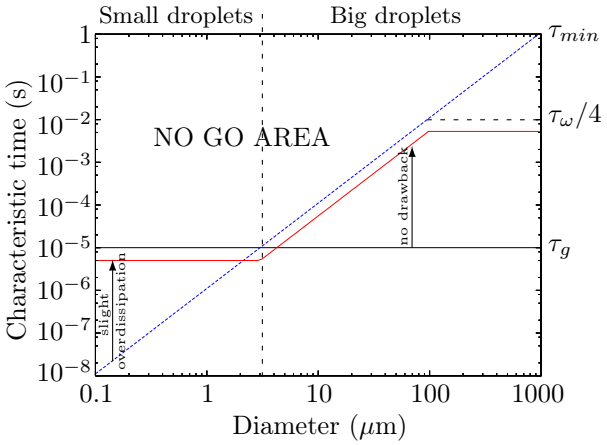


**FIGURE 9.1** – *Tracé des temps caractéristiques en fonction du diamètre des gouttes : **Ligne continue** : Temps de la phase gazeuse $\tau_g$ correspond à un CFL unitaire ; Ligne discontinue : Temps de relaxation des gouttes $\tau_{min}$ ; Red : Pas de temps $\Delta t_a$ préconisé pour le splitting à deux étages avec $K_g = K_p = 0.5$.*

d'un système d'EDO des termes sources entre le gaz et les gouttes. Voici les schémas numériques retenus pour chaque opérateur de la stratégie de splitting :

– Le transport de la phase gazeuse est résolu avec une méthode d'évaluation des flux convectifs WENO5 (cf. §7.2.2.2) intégrée avec un schéma explicite Runge-Kutta d'ordre 3. Nous limitons ainsi la diffusion et la dispersion de la solution numérique dans l'espace physique même pour des valeurs de $\text{CFL}_g$ assez faibles. Ce type de méthodes est également apprécié pour l'étude des chocs mais ces schémas se prêtent également bien aux études acoustiques. Trois catégories de conditions aux limites ont été implémentées : une condition d'injection acoustique, une condition de sortie non réfléchissante et des limites périodiques. Les détails pour l'implémentation des conditions aux limites sont donnés dans [Shu, 1997].

– Le transport de la phase dispersée, qui est découplé en sections, utilise le schéma cinétique de Bouchut d'ordre 2 [Bouchut et al., 2003] dans le cadre de la résolution des systèmes de gaz sans pression. Comme illustré dans la Fig.(9.4), ce schéma est assez diffusif ce qui implique de travailler avec des valeurs de $\text{CFL}_{conv}$ aussi proche de 1 que possible. Ce point souligne l'intérêt de la stratégie de splitting à deux étages pour laquelle le pas de temps convectif $\Delta t_c$ est suffisamment élevé pour résoudre la convection des gouttes des différentes sections/samples avec $\text{CFL}_{conv}$ proches de 1.

– L'opérateur des termes sources, dans le cas de gouttes inertes, revient à résoudre uniquement les termes intra-sectionnels pour les méthodes MF et d'une manière plus globale à intégrer la force de traînée et le terme d'échange de chaleur. La méthode numérique choisie est l'approche RADAU5 [Hairer and Wanner, 1996], qui est un solveur implicite Runge-Kutta d'ordre 5 dont le pas de temps adaptatif permet de maintenir un niveau d'erreur constant. Cette méthode est A-stable et L-stable et a été développée pour les systèmes d'EDO raides. L'écriture de ce solveur et son implémentation dans SAP1 reprend en grande partie les travaux d'optimisation de l'équipe d'Ernst Hairer au sein du groupe Geneva. Dans le cas des sprays réactifs, nous utilisons le schéma SRST développé et présenté en détails dans le chapitre 8.

## 9.2 Validations acoustiques diphasiques 1D de la stratégie de splitting

### 9.2.1 Cas d'un spray inerte monocomposant

#### 9.2.1.1 Présentation de l'étude

Nous considérons une onde acoustique plane caractérisée par une fréquence de 1000Hz et une amplitude relative de $10^{-4}$. Les hypothèses de propagation acoustique en régime linéaire et de lois de Stokes pour les interactions entre phases sont justifiées. Pour se rapprocher des conditions de chambre d'un MPS après combustion, nous prenons une température de 3600K et une pression égale à 50bar. La vitesse du son dans la phase gazeuse composée des produits de combustion et des fumées

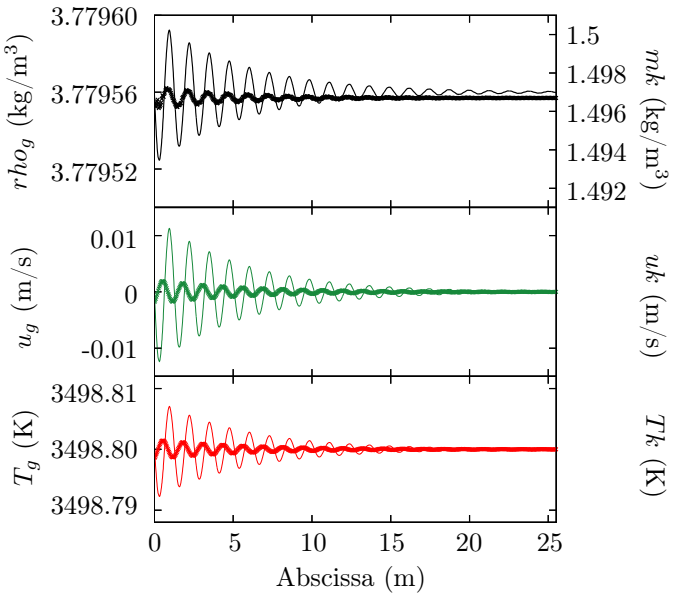


**FIGURE 9.2** – *Simulation SAP1 de la propagation d'une onde acoustique dans un milieu diphasique au repos pour une distribution en taille monodisperse avec $St_{acou} = 20$ et $\mu_p = 0.106$. Légende : − : variables du gaz et − + − : variables de la phase dispersée.*

d'alumine est estimée à $c_0 = 1275$m/s. La viscosité dynamique est égale à $\nu_g = 8.855.10^{-5}$Pa.s. La masse volumique des résidus est 1766kg/m$^3$ et le taux de chargement total de la phase dispersée est $\mu_p = 0.394$.
Un maillage 1D composé d'une unique rangée de 2000 cellules est utilisé. Nous étudions la propagation de l'onde sur un domaine de calcul long de 25.51m ce qui représente une analyse basée sur un minimum de 20 périodes pour les conditions de calcul données précédemment. Une illustration des résultats est donnée en Fig.(9.2), les champs instantanés des fluctuations des variables des phases gazeuse et liquide sur le domaine spatial y sont présentés. La résolution spatiale de la perturbation acoustique est d'environ 100 points par onde ce qui assure une diffusion numérique limitée de la structure de l'onde quand le pas de temps est judicieusement choisi pour le transport de la phase gazeuse. Des calculs préliminaires sont d'ailleurs réalisés afin de s'assurer que l'atténuation observée est due aux interactions entre phases et non à un mauvais traitement numérique de la propagation acoustique. Un grand nombre de points par onde garantit une précision élevé sur l'étape de post-traitement de l'atténuation $\alpha^\star$ et la dispersion $\beta^\star$ de l'onde. Cette étape repose notamment sur la détermination des extrema de la fluctuation et de leurs positions. Une stratégie consistant à interpoler le profil discret du signal acoustique afin de minimiser les erreurs possibles est aussi adoptée.
Pour des phases dispersées dont la distribution en taille est monodisperse, il est possible d'exprimer l'atténuation et la dispersion acoustique en fonction du nombre de Stokes acoustique des gouttes. Les différentes configurations étudiées consistent à faire varier la taille des gouttes mais à conserver la même fréquence pour l'onde et donc le même maillage. Les distributions monodisperses sont modélisées via la méthode OSM-MF avec une seule section dont la largeur est extrêmement faible. On choisit $\Delta r = 10$nm ce qui conduit à des résultats équivalents pour une approche MC ou TSM-MF. En effet, la différence entre les temps de relaxation des gouttes correspondant aux bornes des sections est négligeable. Nous utilisons la méthode de splitting à deux étages avec un formalisme de Strang pour l'opérateur acoustique. L'opérateur des termes sources inertes emploie le solveur implicite RADAU5.

#### 9.2.1.2 Résultats numériques pour un milieu diphasique au repos

Nous cherchons à évaluer la qualité de la solution numérique en fonction de différents pas de temps $\Delta t_a$ et pour différentes tailles de gouttes. Nous choisissons ainsi plusieurs coefficients $K_g$ et nous étudions de façon empirique l'erreur de splitting en comparant l'évolution de la perturbation acoustique à celle obtenue par la relation de dispersion établie dans §5.2.2. Pour l'ensemble des simulations, nous fixons $K_p = 0.5$.
Dans la Fig.(9.3), nous traçons les résultats de l'atténuation $\alpha^\star$ et de la dispersion $\beta^\star$ pour différentes valeurs de $K_g$. Dans un premier temps, nous obtenons des résultats aberrants quand $K_g \geq 1$ avec les plus petites tailles de gouttes caractérisées par des faibles nombres de Stokes. Ces valeurs

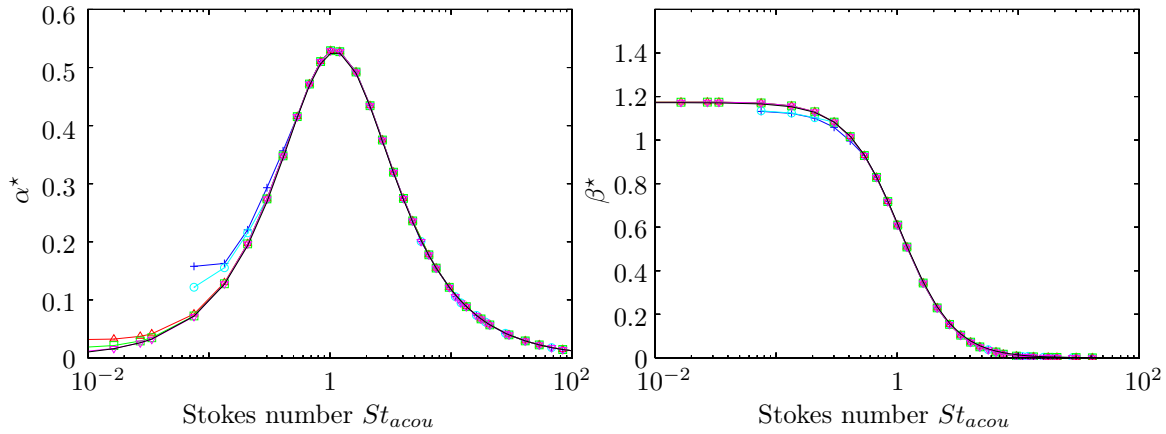


**FIGURE 9.3** – *Atténuation et dispersion d'une onde acoustique plane dans un milieu diphasique composé d'un spray monodisperse inerte présentant un taux de chargement $\mu_p = 0.106$ pour différents pas de temps (code SAP1 utilisant $K_p = 0.25$) : – : Solution analytique ; + : $K_g = 2$ ; ∘ : $K_g = 1$ ; Δ : $K_g = 0.9$ ; □ : $K_g = 0.5$ ; ▽ : $K_g = 0.2$.*

ne sont pas reportées sur les courbes. Pour $St_{acou} \to 0$, les gouttes réagissent instantanément aux fluctuations du gaz, le milieu est vu comme un seul fluide avec des propriétés thermophysiques moyennes représentatives du mélange gaz plus gouttes. Ce régime asymptotique n'est donc pas restitué pour des pas de temps plus grands que les temps caractéristiques du problème. Ici, ce sont les temps de relaxation des gouttes ce qui correspond à la partie "NO GO AREA" de la Fig.(9.2). Puis, nous notons des résultats satisfaisants pour $K_g < 1$ mais nous relevons toutefois une sur-atténuation de l'onde pour des valeurs de $K_g$ proche de 1. Cela se traduit par une valeur constante de l'atténuation dans la limite des petits nombres de Stokes. Les résultats convergent pour $K_g \leq 0.2$. L'erreur de splitting commise pour des pas de temps trop grands était prévisible dans la mesure où les interactions entre les phases ne sont pas correctement prises en compte. Dans le contexte des écoulements diphasiques présentant une phase dispersée dense, une erreur de splitting a été identifiée pour les cas des petites gouttes pour lesquels les temps de relaxation sont faibles et les termes sources de couplage entre les phases sont particulièrement raides. Dans §9.3, nous proposons une analyse mathématique de l'erreur de splitting qui explique les observations faites.

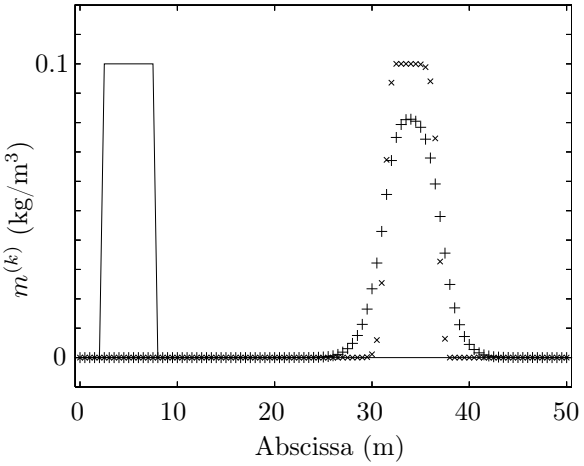


**FIGURE 9.4** – *Convection d'une concentration spatiale de gouttes de type fenêtre avec un pas de temps piloté par l'acoustique (convection de la structure 30m/s, schéma de Bouchut d'ordre 2, code SAP1) : Ligne continue : Solution initiale ; + : Solution numérique pour un $CFL^{(k)}_{conv} = 0.081$ ; × : Solution numérique pour un $CFL^{(k)}_{conv} = 0.94$.*

Finalement, nous comparons les résultats à la solution analytique pour le cas $K_g = 0.5$. Les erreurs relatives sur $\alpha^\star$ et $\beta^\star$ sont inférieures à 2% pour $St_{acou} > 5.10^{-2}$ ce qui est excellent. Ces erreurs relatives deviennent plus importantes pour des nombres de Stokes plus faibles dans la mesure où l'erreur de splitting se traduit par des valeurs constantes pour l'atténuation et la dispersion. Ce cas d'étude illustre l'efficacité de la stratégie de splitting, et plus particulièrement de l'opérateur $\mathcal{A}$, à restituer le couplage acoustique-phase dispersée pour des pas de temps judicieusement choisis.
Le milieu diphasique étant initialement au repos, la vitesse des gouttes induite par le passage de l'onde acoustique reste très faible, l'étude du transport de la phase dispersée n'est donc pas réalisée.

Dans la partie suivante, nous évaluons complètement la stratégie à deux étages en considérant un milieu diphasique en mouvement.

#### 9.2.1.3 Résultats numériques pour un milieu diphasique en mouvement

La résolution du transport de la phase dispersée est une source majeure d'erreurs car la plupart des schémas actuels présente une diffusion numérique importante quand $\mathrm{CFL}_{conv} << 1$. Pour illustrer l'intérêt du splitting à deux étages, nous comparons deux simulations pour lesquelles une concentration des gouttes locale dans le domaine (répartition uniforme de type fenêtre) est convectée selon deux pas de temps. Aucun couplage avec le gaz n'est considéré dans cette étude préliminaire ; il s'agit d'un cas de convection pure. Le premier pas de temps utilisé est assez petit de manière à reproduire une situation où il est contraint par l'acoustique comme cela peut être le cas pour le splitting sans sous-cyclage du transport liquide. Nous avons ici $\mathrm{CFL}_{conv} = 0.081$. Le second pas de temps est choisi favorablement pour le schéma cinétique de Bouchut pour un $\mathrm{CFL}_{conv}$ proche de 1. Dans notre étude, il est égal à 0.94. Notons que la taille des gouttes convectées n'a aucune incidence. Les résultats, présentés dans la Fig.(9.4), illustrent la diffusion spatiale de la concentration des gouttes pour le plus petit pas de temps.
Nous soulignons la pertinence du sous-cyclage pour le cas d'étude acoustique étudié précédemment. A l'instant initial, nous considérons un mouvement d'ensemble du mélange gaz plus gouttes tel que $u_g = u = 150\mathrm{m/s}$. La solution de la propagation d'une onde acoustique dans ce milieu est triviale car elle peut être décrite par la même relation de dispersion une fois considéré le changement de repère approprié. Ce cas d'étude est donc particulièrement adapté pour valider la phase de transport des gouttes tout en gardant un couplage similaire à l'étude précédente car il est réalisé pour deux phases convectées à la même vitesse.
Comme illustré dans la Fig.(9.5), nous initialisons le milieu en mouvement via une perturbation acoustique composée de trois périodes d'onde. Des conditions aux limites périodiques sont appliquées aux deux extrémités du domaine. Ainsi, la structure acoustique peut être transportée sur un domaine "infini".

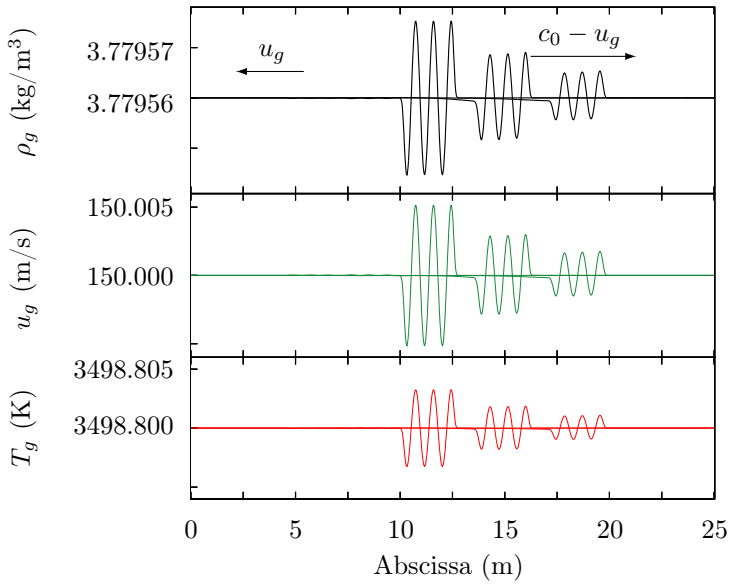


**FIGURE 9.5** – *Simulation de la propagation d'une perturbation acoustique dans un milieu diphasique en mouvement constitué d'un spray monodisperse inerte présentant un taux de chargement $\mu_p = 0.106$. Présentation des variables du gaz à trois instants (La structure acoustique initiale correspond aux trois périodes d'onde au centre du domaine).*

La Fig.(9.6) présente les résultats pour l'atténuation du profil acoustique dans le repère en mouvement. Ces derniers sont très satisfaisants avec des erreurs équivalentes au cas du milieu au repos ce qui valide la principe de splitting à deux étages.

### 9.2.2 Cas d'un spray inerte bicomposant

#### 9.2.2.1 Présentation de l'étude

Nous proposons d'étendre l'étude d'acoustique diphasique aux cas des gouttes bicomposantes. Une relation de dispersion pour les sprays polydisperses bicomposants peut être dérivée en utilisant

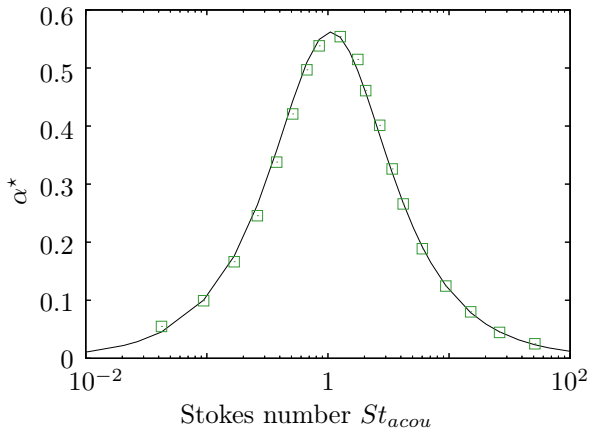


**FIGURE 9.6** – *Atténuation d'une perturbation acoustique (trois périodes d'onde) dans un milieu diphasique en mouvement constitué d'un spray monodisperse inerte présentant un taux de chargement $\mu_p = 0.106$. **Ligne continue** : Solution analytique ; □ : Résultats SAP1 avec $K_g = 0.9$.*

le formalisme MF introduit dans le chapitre 6. Comme dans le cas monocomposant, la stratégie consiste à linéariser les équations du gaz ainsi que les $\mathrm{N_{al}} \times \mathrm{N_{ox}}$ systèmes d'équations de conservation. La relation de dispersion polydisperse est donnée par :

$$\left(\frac{\underline{k}c_0}{\omega}\right)^2 \left[1 + \frac{1}{c_{p,g}} \sum_{j=1}^{\mathrm{N_{ox}}} \sum_{k=1}^{\mathrm{N_{al}}} \frac{\mu^{(k,j)} c_{p,p}^{(k,j)}}{1 - i\omega\tau_T^{(k,j)}}\right] = \left[1 + \frac{\gamma}{c_{p,g}} \sum_{j=1}^{\mathrm{N_{ox}}} \sum_{k=1}^{\mathrm{N_{al}}} \frac{\mu^{(k,j)} c_{p,p}^{(k,j)}}{1 - i\omega\tau_T^{(k,j)}}\right] \left[1 + \sum_{j=1}^{\mathrm{N_{ox}}} \sum_{k=1}^{\mathrm{N_{al}}} \frac{\mu^{(k,j)}}{1 - i\omega\tau_u^{(k,j)}}\right] \tag{9.3}$$

où $\mu^{(k,j)} = m^{(k,j)}/\rho_0$ est le rapport massique de la section $(k,j)$, qui compare la concentration massique en gouttes à la masse volumique du gaz $\rho_0$ pour l'état stationnaire. Nous notons toujours la concentration massique totale de la phase dispersée $\mu_p$. Les temps de relaxation dynamique et thermique sont respectivement notés $\tau_u^{(k,j)}$ et $\tau_T^{(k,j)}$.

**TABLE 9.1** – *Propriétés du gaz et des gouttes*

| Property | Value | Property | Value |
|---|---|---|---|
| $T_0$ | 2400 K | $\mu_p$ | 0.396 |
| $\rho_0$ | 3.78 kg/m$^3$ | $\rho_{al}$ | 1500 kg/m$^3$ |
| $\rho_{ox}$ | 1800 kg/m$^3$ | $Y_{ox}$ | 0.1 |
| $c_{p,g}$ | 2021.8 J/kg/K | $c_{p,al}$ | 1177 J/kg/K |
| $\gamma$ | 1.23 | $c_{p,ox}$ | 1700 J/kg/K |
| $\mu_g$ | $9.1\,10^{-5}$ kg/m/s | $Pr$ | 0.8 |

**TABLE 9.2** – *Répartitions en masses des sprays bicomposants monodisperse et polydisperse étudiés dans le cadre de l'étude d'acoustique diphasique inerte*

| Distribution | Diamètre ($\mu$m) | Concentration (kg/m$^3$) | Temps de relaxation dynamique (s) |
|---|---|---|---|
| Polydisperse | 1.05 | 0.499 | $4.0\,10^{-6}$ |
| | 4.35 | 0.499 | $1.76\,10^{-5}$ |
| | 6.84 | 0.499 | $4.35\,10^{-5}$ |
| Monodisperse | 6.27 | 1.497 | $3.66\,10^{-5}$ |

**TABLE 9.3** – *Discrétisation MF bicompsante de l'espace des masses*

| Polydisperse (6 sections) | | | | |
|---|---|---|---|---|
| $m_{ox}$ (kg) | 0.0 | $4.93\,10^{-15}$ | $3.94\,10^{-14}$ | |
| $m_{al}$ (kg) | 0.0 | $1.31\,10^{-14}$ | $1.05\,10^{-13}$ | $3.54\,10^{-13}$ |
| Monodisperse (1 section) | | | | |
| $m_{ox}$ (kg) | 0.0 | $3.94\,10^{-14}$ | | |
| $m_{al}$ (kg) | 0.0 | $3.54\,10^{-13}$ | | |

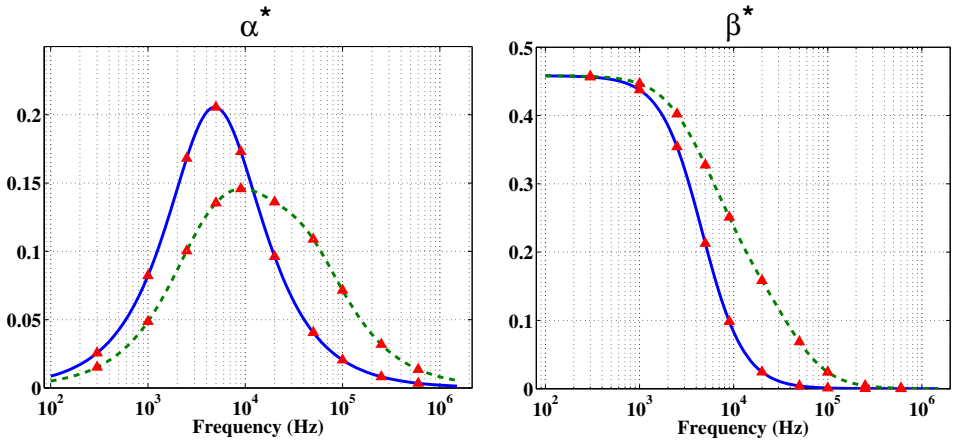


**FIGURE 9.7** – *Atténuation et dispersion d'une onde acoustique pour deux distributions bicomposantes inertes : — : Solution analytique du spray monodisperse ; – – : Solution analytique du spray polydisperse* △ *: résultats SAP1*

#### 9.2.2.2 Résultats numériques

Ce cas test constitue une première vérification du modèle MF bicomposant pour des particules inertes. Cette étude numérique 1D reprend la même méthodologie que l'étude monocomposante inerte. En Fig.(9.7), nous proposons deux simulations caractérisées par deux distributions en masse : une distribution monodisperse et une distribution polydisperse composée de trois tailles de gouttes. Pour le cas polydisperse, la masse est équitablement répartie et la fraction massique d'alumine est la même pour les trois tailles de gouttes. La discrétisation MF utilisée pour cette étude est donnée en Tab.(9.2) ; nous choisissons alors trois sections 2D définies par $((m_{al},m_{ox})$=(1,1) ;(2,2) ;(3,2)). Pour l'ensemble des simulations, le temps de relaxation de la plus petite taille de gouttes est $4.10^{-6}$s. Nous choisissons un pas de temps égal à $\Delta t = 3.10^{-6}$s afin de résoudre au mieux l'ensemble des interactions diphasiques. L'intégration des termes sources est réalisée avec un schéma SRST dédié aux sprays bicomposants comme présenté dans §8.1.3. Pour tous les calculs, la même fréquence est utilisée pour l'excitation acoustique ce qui permet de conserver le même maillage. Le nombre de points par onde est d'environ 50 afin de minimiser la dissipation numérique de l'onde acoustique. Comme cela a été observé pour les sprays monocomposants, la nature bicomposante ne modifie pas l'impact de la phase condensée sur les perturbations acoustiques. Pour la distribution polydisperse, nous retrouvons également une courbe d'atténuation plus étendue avec un maximum moins important que pour le cas monodisperse. Nous obtenons de très bons résultats avec des erreurs sur l'atténuation et la dispersion inférieures à 1%. Cette étude souligne à nouveau la pertinence d'une stratégie de splitting dans le contexte des sprays bicomposants.

### 9.2.3 Cas d'un spray évaporant monocomposant

L'étude acoustique suivante a pour objectif de valider la stratégie de splitting dans le cadre des sprays évaporants polydisperses. De plus, elle constitue également une seconde vérification du schéma SRST dont l'évaluation a été faite dans le cadre de simulation 0D dans le chapitre 8.

#### 9.2.3.1 Présentation de l'étude

La configuration proposée reprend les principaux paramètres donnés dans §9.2.1.1. Nous nous plaçons dans la situation où le milieu diphasique est au repos. Nous étudions une distribution en taille polydisperse décrite par une fonction lognormale. Nous reprenons les mêmes paramètres que ceux retenus en §5.2.3 lors de l'analyse de la discrétisation sectionnelle pour les méthodes MF. Deux milieux diphasiques sont considérés ici pour les deux chaleurs latentes de vaporisation présentées dans §5.2.3. Les propriétés thermophysiques sont fournies par le Tab.(5.1). Pour chaque configuration, nous réalisons un ensemble de simulations avec différentes fréquences acoustiques. Nous utilisons la méthode de splitting à deux étages avec un formalisme de Strang pour l'opérateur acoustique. L'opérateur des termes sources réactifs emploie la version RK2-TVD du schéma SRST. Nous choisissons 8 sections et une discrétisation de l'espace des tailles basée sur une répartition $\Delta r = cst$. Cette discrétisation est la plus pertinente pour les situations d'évaporation comme montré dans l'analyse 0D du §8.3. Comme présenté dans §5.2, 8 sections sont suffisantes pour

**TABLE 9.4** – *Pas de temps $\Delta t_a$ fonction des fréquences acoustiques étudiées*

| 5 Hz $\Rightarrow$ 200Hz | $\Delta t_{a,1} = 5.10^{-5}$s | $\Delta t_{a,2} = 8.10^{-5}$s |
|---|---|---|
| 500 Hz | $\Delta t_{a,1} = \Delta t_{a,2} = 2.8\,10^{-5}$s | |
| 1000 Hz | $\Delta t_{a,1} = \Delta t_{a,2} = 1.4\,10^{-5}$s | |
| 5000 Hz | $\Delta t_{a,1} = \Delta t_{a,2} = 2.8\,10^{-6}$s | |
| 10000 Hz | $\Delta t_{a,1} = \Delta t_{a,2} = 1.4\,10^{-6}$s | |

obtenir une réponse acoustique précise avec le modèle OSM-MF. Avec l'approche TSM-MF, nous souhaitons obtenir des résultats de meilleures qualités. Comme pour l'étude du spray inerte, le temps de simulation $T_{simu}$ et la longueur du domaine sont fonctions de la fréquence de l'onde acoustique. Pour la configuration 10Hz, le domaine mesure 1500m et $T_{simu}$ est fixé à 1.5s. Pour la fréquence 10000Hz, le domaine est donc de 1.5m et le temps simulé est de $1.5\,10^{-3}$s. Finalement, le pas de temps $\Delta t_c$ utilisé pour la convection de la phase dispersée est égal à $T_{simu}/10$.

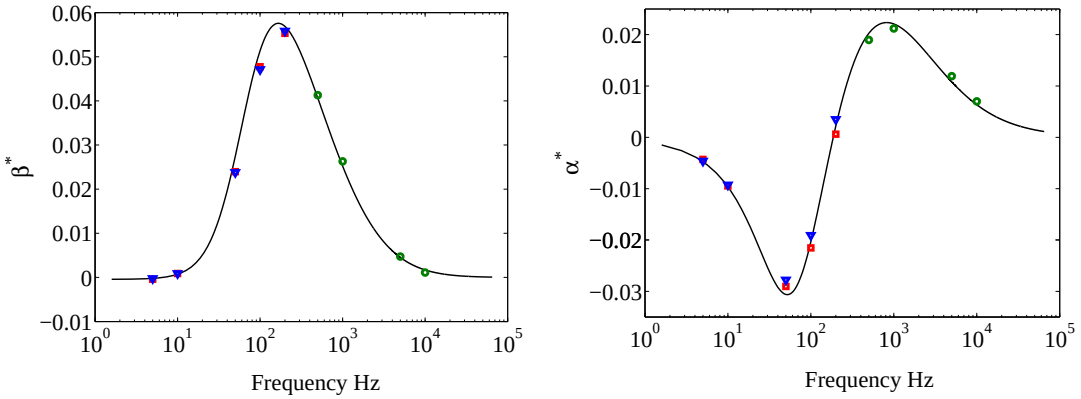


**FIGURE 9.8** – *Dispersion $\beta^*$ et atténuation $\alpha^*$ d'une onde acoustique dans un milieu diphasique évaporant avec une distribution lognormale pour le spray monocomposant. Configuration avec 8 sections et la chaleur latente $L_{v,1}$ : Ligne continue : Solution analytique ; $\square$ $\Delta t_{a,1} = 5.10^{-5}s$ ; $\triangledown$ : $\Delta t_{a,2} = 8.10^{-5}s$ ; $\circ$ : $\Delta t_{a,1} = \Delta t_{a,2}$ comme fourni dans le Tab.(9.4)*

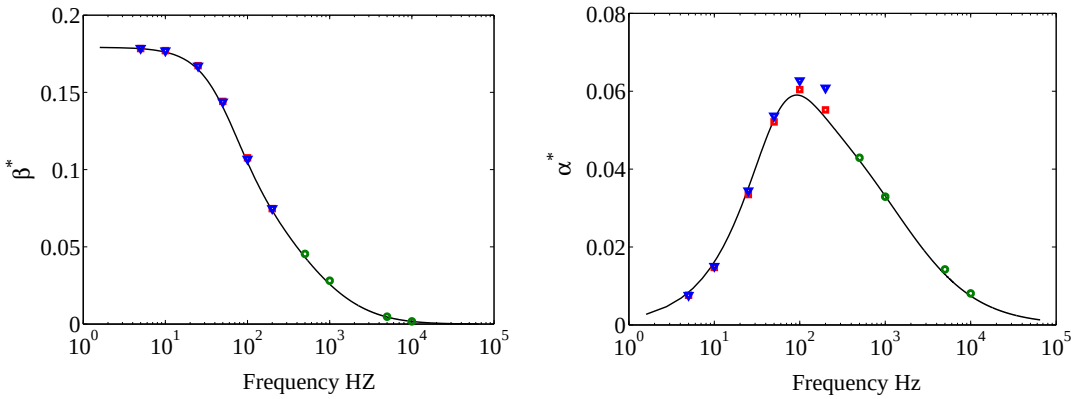


**FIGURE 9.9** – *Dispersion $\beta^*$ et atténuation $\alpha^*$ d'une onde acoustique dans un milieu diphasique évaporant avec une distribution lognormale pour le spray composant. Configuration avec 8 sections et la chaleur latente $L_{v,2}$ : Ligne continue : Solution analytique ; $\square$ $\Delta t_{a,1} = 5.10^{-5}s$ ; $\triangledown$ : $\Delta t_{a,2} = 8.10^{-5}s$ ; $\circ$ : $\Delta t_{a,1} = \Delta t_{a,2}$ comme fourni dans le Tab.(9.4)*

Pour les calculs présentant une fréquence supérieure à 500Hz, le respect du critère CFL devient très restrictif en raison de la taille des cellules. Cela implique de choisir un pas de temps plus petit que pour les cas avec des fréquences moins élevées. Pour les fréquences les plus basses, nous évaluons la stratégie de splitting en utilisant deux pas de temps $\Delta t_{a,1} = 5.10^{-5}$ et $\Delta t_{a,2} = 8.10^{-5}$s. En Tab.(9.4), nous précisons les pas de temps employés pour chaque simulation.
Pour les simulations réalisées avec le pas de temps $\Delta t_{a,1}$, les gouttes ayant un rayon inférieur à $6\mu$m présentent des temps de relaxation plus courts que le pas de temps ce qui suppose que les interactions diphasiques ne sont pas correctement résolues. Pour les cas employant le pas de temps $\Delta t_{a,2}$, plus grand, ce sont les gouttes dont le rayon est inférieur à $7.53\mu$m qui présentent des temps

de relaxation plus courts.

#### 9.2.3.2 Résultats numériques et conclusion

Les résultats des simulations SAP1, fournis dans les Fig.(9.8)&(9.9) pour les deux valeurs de chaleur latente $L_{v,1}$ et $L_{v,2}$ (cf. §5.2), sont comparés aux solutions analytiques obtenues à partir de la relation de dispersion Eq.(B.10) avec 8 sections. Ce nombre de sections est suffisant pour minimiser l'effet de la discrétisation en taille pour la méthode MF (cf. §5.2.4).
Les comportements antagonistes relevés sur l'atténuation pour les deux chaleurs latentes sont correctement restitués par les simulations. Pour les simulations réalisées avec $\Delta t_{a,1}$, les résultats sont satisfaisants car les erreurs relatives sont inférieures à 5% pour $\alpha^*$ et $\beta^*$. Quand $\Delta t_{a,2}$ est utilisé, la qualité de la solution est équivalente à celle des cas $\Delta t_{a,1}$ pour la dispersion. Nous observons toutefois des erreurs plus importantes pour l'atténuation. Une sur-atténuation de l'onde est observée à la fois pour la configuration $L_{v,1}$ au niveau de son maximum d'amplitude à 50Hz et pour le cas $L_{v,2}$ au niveau de son pic d'atténuation à 100 Hz. Dans les deux cas, les erreurs sur $\alpha^*$ sont de l'ordre de 15%. Cette erreur de splitting a été observée dans l'étude acoustique inerte §9.2.1.2 quand le pas de temps est trop grand par rapport aux temps caractéristiques des gouttes, ici pour celles qui ont un rayon inférieur à 7.53$\mu$m. Nous avions également relevé que cette erreur est particulièrement marquée quand le nombre de Stokes des gouttes étudiées est inférieur à 1. Nous confirmons cette observation pour le spray polydisperse évaporant et les deux cas d'étude :
1- Pour la simulation $L_{v,1}$ et à la fréquence de 50Hz, nous avons $St_{acou} < 0.025$ pour $r_p < 7.53\mu$m.
2- Pour la simulation $L_{v,2}$ et à la fréquence de 100Hz, nous avons $St_{acou} < 0.05$ pour $r_p < 7.53\mu$m.
Finalement, cette étude numérique valide trois développements :

1. Nous validons la méthode MF pour la description d'une phase polydisperse en évaporation à partir de l'étude analytique proposée dans §5.2 pour la stratégie de discrétisation sectionnelle.

2. Nous vérifions le schéma SRST dans un cadre plus général c'est-à-dire pour l'intégration des termes d'échanges de quantité de mouvement et d'énergie avec le gaz alors que l'étude présentée dans §8.3.1 portait plus spécifiquement sur le calcul des flux entre sections.

3. Nous confirmons l'efficacité de la technique pour assurer le couplage particulièrement complexe entre le gaz et un spray polydisperse évaporant. Si les critères de stabilité sont assurés pour chaque opérateur, cette stratégie est robuste et suffisamment précise même avec des pas de temps de splitting supérieurs aux échelles temporelles les plus rapides du problème.

## 9.3 Analyse mathématique de l'erreur de splitting dans le contexte de l'acoustique diphasique linéaire

Cette partie est constituée des travaux présentés à la conférence WONAPDE qui s'est tenue à Concepcion au Chili en 2013 :

– A. Sibra, M. Massot, F. Laurent et J. Dupays. *Splitting method for hyperbolic systems with stiff relaxation source terms : analysis and application to polydisperse sprays in solid rocket motors*

Dans le cadre de l'acoustique linéaire diphasique, nous avons mis en évidence la dégradation en précision de la méthode de splitting lorsque $\Delta t > \tau_{min}$. Nous avons notamment relevé une surat̀énuation $\alpha^*$ de la perturbation acoustique. Cependant, cela ne permet pas de caractériser rigoureusement l'erreur de splitting. Nous proposons donc d'étudier l'erreur faite sur les variables du problème.
Nous reprenons la stratégie de séparation en sous-systèmes de transport et de traitement des termes sources. Chaque opérateur est résolu exactement ce qui n'introduit aucune erreur au sein des sous-systèmes. Nous évaluons ainsi l'ordre en temps de la stratégie de splitting dans la limite asymptotique des petits temps de relaxation. Cette analyse est réalisée pour les deux stratégies de splitting utilisées dans le cadre de cette thèse i.e. l'approche de Lie et de Strang. Quand le pas de temps de splitting est inférieur aux plus petites échelles temporelles, elles sont respectivement d'ordre 1 et d'ordre 2. Mais pour des équations de réaction-diffusion, il a été montré dans [Descombes and Massot, 2004] la dégénérescence de l'ordre du splitting, pour Lie et pour Strang, quand le temps caractéristique du système devient plus petit que le pas de temps.
L'analyse réalisée par la suite vise à montrer ce même phénomène pour notre problème, c'est-à-dire une dégénérescence en ordre de la méthode pour un pas de temps trop grand et dans la limite des petits Stokes i.e. pour des temps de relaxation rapides. Sur la base d'un système diphasique monodisperse, nous établissons une hiérarchie de systèmes linéaires simples pour lesquels il existe une solution exacte de l'évolution des variables et de la réponse acoustique.

### 9.3.1 Identification des systèmes différentiels "splittés" dans le cas d'un spray inerte mondisperse

Nous nous plaçons dans le cas d'un système diphasique décrivant le couplage entre un spray monodisperse inerte et la phase gazeuse. Dans le contexte de l'acoustique diphasique linéaire, ce système se simplifie sous la forme suivante :

$$\begin{cases} \partial_t \rho_g + c_0 \partial_x u_g & = 0 \\ \partial_t u_g + \dfrac{c_0}{\gamma} \partial_x (\rho_g + T_g) & = \dfrac{\mu}{\tau_u}(u_p - u_g) \\ \partial_t T_g + c_0(\gamma - 1)\partial_x u_g & = \dfrac{\gamma \mu h}{\tau_T}(T_p - T_g) \\ \\ \partial_t \rho_p + c_0 \partial_x u_p & = 0 \\ \partial_t u_p & = -\dfrac{1}{\tau_u}(u_p - u_g) \\ \partial_t T_p & = -\dfrac{1}{\tau_T}(T_p - T_g) \end{cases} \tag{9.4}$$

Comme présenté dans §7.1.4.1, nous décomposons le problème en deux sous-systèmes. Le premier utilise l'opérateur de transport noté $\mathcal{T}$ :

$$\mathcal{T} \begin{cases} \partial_t \rho_g + c_0 \partial_x u_g = 0 \\ \partial_t u_g + \dfrac{c_0}{\gamma} \partial_x (\rho_g + T_g) = 0 \\ \partial_t T_g + c_0(\gamma - 1)\partial_x u_g = 0 \\ \\ \partial_t \rho_p + c_0 \partial_x u_p = 0 \\ \partial_t u_p = 0 \\ \partial_t T_p = 0 \end{cases} \tag{9.5}$$

Le second opérateur, noté $\mathcal{R}$, correspond à la relaxation entre les variables des deux phases via les

termes sources :

$$\mathcal{R}\begin{cases} \partial_t \rho_g = 0 \\ \partial_t u_g = \dfrac{\mu}{\tau^u}(u_p - u_g) \\ \partial_t T_g = \dfrac{\gamma \mu h}{\tau^T}(T_p - T_g) \\ \\ \partial_t \rho_p = 0 \\ \partial_t u_p = -\dfrac{1}{\tau^u}(u_p - u_g) \\ \partial_t T_p = -\dfrac{1}{\tau^T}(T_p - T_g) \end{cases} \tag{9.6}$$

Pour le système diphasique présenté précédemment, une première approche consiste à écrire le système différentiel :

$$\begin{cases} \dfrac{dq}{dt} = Tq + Rq \\ q(0) = q_0 \end{cases} \tag{9.7}$$

Le flot de cette équation différentielle complète s'écrit : $\Phi(q_0, t) = \exp((T+R)t)q_0$ alors que les flots des deux systèmes différentiels découplés s'expriment :

$$\begin{cases} \Phi^T(q_0, t) = \exp(Tt)q_0 \\ \Phi^R(q_0, t) = \exp(Rt)q_0 \end{cases} \tag{9.8}$$

– Pour un splitting de Lie, l'erreur locale s'écrit :

$$e^{(T+R)t} - e^{Tt}e^{Rt} = \frac{t^2}{2}[R, T] + \mathcal{O}(t^3) \tag{9.9}$$

Le commutateur s'exprime sous la forme suivante : $[R, T] = RT - TR$

– Pour un splitting de Strang, l'erreur locale est :

$$e^{(T+R)t} - e^{R\frac{t}{2}}e^{Tt}e^{R\frac{t}{2}} = \frac{t^3}{24}(TR^2 + R^2T + 4TRT - 2RTR - 2RT^2 - 2T^2R) + \mathcal{O}(t^4) \tag{9.10}$$

La difficulté posée par le système diphasique est le calcul particulièrement complexe des différents termes tels que le commutateur $[R, T]$. Notre stratégie consiste donc à mettre en place une hiérarchie de modèles simplifiés pour lesquels il est possible de résoudre exactement chaque sous-sytème soit par une approche analytique soit par une étude numérique.

### 9.3.2 Hiérarchie de modèles couplés pour l'étude de l'erreur de splitting

Nous souhaitons mettre en évidence l'erreur locale de splitting et plus précisément la dégénérescence de la méthode. Autrement dit, nous souhaitons faire une étude asymptotique de l'erreur pour chacun des modèles selon que $\frac{t}{\varepsilon} \gg 1$ ou $\frac{t}{\varepsilon} \ll 1$.

#### 9.3.2.1 Le modèle à 1 équation

Pour une étude préliminaire, il est pertinent de choisir une simple équation d'advection à vitesse constante et un terme source modélisant un couplage externe :

$$\partial_t u + a\partial_x u = \frac{\phi(t, x) - u}{\varepsilon} \tag{9.11}$$

où $u$ est un champ scalaire et $u^0(x)$, $x \in \mathbb{R}$ sa donnée initiale qui dépend du temps et de l'espace $\phi(t, x) \in \mathbb{R}$. Le paramètre $\varepsilon$ s'apparente ici à un temps de relaxation. Le problème devient raide quand ce paramètre est suffisamment petit.

#### 9.3.2.2 Le modèle à 3 équations

Nous posons maintenant une équation de conservation sur une variable $\phi = \frac{P}{\rho_0 c_0}$ et deux équations d'advection couplés par leurs termes sources. Ce modèle est proche du modèle couplé à six équations

dans la mesure où les équations de conservation sur la quantité de mouvement sont découplées des équations sur l'énergie.

$$\begin{cases} \partial_t \phi + c_0 \partial_x \phi = 0 \\ \partial_t u + c_0 \partial_x u = \mu \dfrac{v-u}{\varepsilon} \\ \partial_t v = \dfrac{u-v}{\varepsilon} \end{cases} \tag{9.12}$$

#### 9.3.2.3 Le modèle à 5 équations

La différence principale avec le modèle précédent est l'ajout des équations sur les températures.

$$\begin{cases} \partial_t \rho_g + c_0 \partial_x u_g & = 0 \\ \partial_t u_g + \dfrac{c_0}{\gamma} \partial_x (\rho_g + T_g) & = \dfrac{\mu}{\tau_u}(u_p - u_g) \\ \partial_t T_g + c_0(\gamma - 1)\partial_x u_g & = \dfrac{\mu \gamma h}{\tau_T}(T_p - T_g) \\ \partial_t u_p & = -\dfrac{1}{\tau_u}(u_p - u_g) \\ \partial_t T_p & = -\dfrac{1}{\tau_T}(T_p - T_g) \end{cases} \tag{9.13}$$

Cette approche est donc très similaire au système diphasique complet. Nous négligeons cependant la convection de la phase condensée.

### 9.3.3 Calculs des erreurs de splitting pour les différents modèles

La démarche consiste à déterminer une solution exacte du modèle et à la comparer avec la solution calculée avec splitting i.e. sur la base d'une intégration successive des solutions exactes de chaque sous-système. Pour les deux premier modèles, nous adoptons une approche analytique car la résolution des sous-systèmes est envisageable. Pour le modèle à 5 équations, les solutions sont assez complexes. Nous proposons donc une étude en résolvant numériquement les étapes de transport et de relaxation. Une solution de référence est déterminée en utilisant un très petit pas de temps. Les solutions sont alors comparées avec cette solution convergée.

#### 9.3.3.1 Etude analytique du modèle à 1 équation

La solution exacte de ce modèle s'obtient via la méthode des caractéristiques :

$$u(t,x) = u^0(y - at) e^{\frac{-t}{\varepsilon}} + \frac{1}{\varepsilon} \int_0^t e^{\frac{-q}{\varepsilon}} \phi(t-q, y-aq) \mathrm{d}q \tag{9.14}$$

Nous déterminons maintenant les solutions pour trois stratégies de splitting à savoir :

1. La solution avec splitting de Lie1 $R^t T^t U_0$ est :

$$u^{Lie1}(t,x) = u^0(y - at) e^{\frac{-t}{\varepsilon}} + \frac{1}{\varepsilon} \int_0^t e^{\frac{-q}{\varepsilon}} \phi(t-q, y) \mathrm{d}q \tag{9.15}$$

Un résultat notable est que la variable $u$ ne suit pas l'évolution de $\phi$ le long des caractéristiques. Ce point se conçoit aisément car par définition la méthode de séparation d'opérateurs ne permet pas à la variable $u$ d'être à la fois relaxée et convectée. L'erreur de splitting s'écrit :

$$u^{Lie1}(t,x) - u(t,x) = \frac{1}{\varepsilon} \int_0^t e^{\frac{-q}{\varepsilon}} \left[\phi(t-q, y) - \phi(t-q, y-aq)\right] \mathrm{d}q \tag{9.16}$$

Nous faisons l'hypothèse d'un gradient spatial constant :

$$\phi(t-q, y) - \phi(t-q, y-aq) = \partial_x \phi(t-q, y-aq) aq = \psi aq \tag{9.17}$$

Nous obtenons :

$$u^{Lie1}(t,x) - u(t,x) = a\psi \left[\varepsilon\left(1 - e^{\frac{-t}{\varepsilon}}\right) - te^{\frac{-t}{\varepsilon}}\right] \tag{9.18}$$

Pour $\frac{t}{\varepsilon} \ll 1$,

$$u^{Lie1}(t,x) - u(t,x) \approx -a\psi\frac{t^2}{\varepsilon} \tag{9.19}$$

L'ordre de l'erreur locale est de 2. C'est bien l'ordre attendu pour un splitting de Lie.
Pour $\frac{t}{\varepsilon} \gg 1$,

$$u^{Lie1}(t,x) - u(t,x) \approx a\psi\varepsilon \tag{9.20}$$

C'est un ordre 1 pour l'erreur locale. Dans l'hypothèse où $\varepsilon \longrightarrow 0$ i.e. pour les petites gouttes, nous obtenons $\lim_{\varepsilon \longrightarrow 0} u(t,x) = \phi(t,x)$. Finalement, le terme source est quasi constant et égal à $a\psi$. Ce dernier est donc indépendant de $t$ et de $\varepsilon$ si $\frac{t}{\varepsilon} \gg 1$. La méthode de splitting a dégénéré pour un pas de temps pris trop grand devant le temps de relaxation des particules. Cette erreur constante laisse à penser que l'hypothèse sur l'erreur faite dans le traitement des petites gouttes est bien liée à la stratégie de splitting.

2. La solution avec splitting de Lie2 $T^t R^t U_0$ est :

$$u^{Lie2}(t,x) = u^0(y-at)e^{\frac{-t}{\varepsilon}} + \frac{1}{\varepsilon}\int_0^t e^{\frac{-q}{\varepsilon}}\phi(t-q, y-at)\mathrm{d}q \tag{9.21}$$

L'erreur de splitting est calculée à partir de :

$$u^{Lie2}(t,x) - u(t,x) = \frac{1}{\varepsilon}\int_0^t e^{\frac{-q}{\varepsilon}}\left[\phi(t-q, y-at) - \phi(t-q, y-aq)\right]\mathrm{d}q \tag{9.22}$$

En reprenant les hypothèses faites précédemment, nous trouvons :
Pour $\frac{t}{\varepsilon} \ll 1$,

$$u^{Lie2}(t,x) - u(t,x) \approx -a\psi\frac{t^2}{\varepsilon} \tag{9.23}$$

L'ordre de l'erreur locale est de 2. C'est bien l'ordre attendu pour un splitting de Lie.
Pour $\frac{t}{\varepsilon} \gg 1$,

$$u^{Lie2}(t,x) - u(t,x) \approx -a\psi t \tag{9.24}$$

L'erreur locale est d'ordre 1. A nouveau, la méthode de splitting dégénère pour les petites gouttes avec un pas de temps trop grand.

3. La solution avec splitting de Lie $R^{t/2}T^t R^{t/2}U_0$ est :

$$u^{Strang}(t,x) = u^0(y-at)e^{\frac{-t}{\varepsilon}} + \frac{1}{\varepsilon}\int_0^{t/2} e^{\frac{-q}{\varepsilon}}\phi(t,y)\mathrm{d}q + \frac{1}{\varepsilon}\int_{t/2}^t e^{\frac{-q}{\varepsilon}}\phi(q, y-at)\mathrm{d}q \tag{9.25}$$

L'erreur de splitting est :

$$u^{Strang}(t,x) - u(t,x) = a\psi\left[\varepsilon\left(1 - e^{\frac{-t}{\varepsilon}}\right) - te^{\frac{-t}{\varepsilon}} + t\left(e^{\frac{-t}{\varepsilon}} - e^{\frac{-t}{2\varepsilon}}\right)\right] \tag{9.26}$$

En reprenant les hypothèses faites précédemment, nous trouvons :
Pour $\frac{t}{\varepsilon} \ll 1$,

$$u^{Strang}(t,x) - u(t,x) \approx -a\psi\frac{t^3}{24\varepsilon} \tag{9.27}$$

L'ordre de l'erreur locale est de 3. C'est bien l'ordre attendu pour un splitting de Strang.
Pour $\frac{t}{\varepsilon} \gg 1$,

$$u^{Strang}(t,x) - u(t,x) \approx a\psi\varepsilon \tag{9.28}$$

Nous retrouvons une erreur locale d'ordre 1. Quelle que soit la méthode employée, cette dernière dégénère toujours pour le cas où $\frac{t}{\varepsilon} \gg 1$.

#### 9.3.3.2 Etude analytique du modèle à 3 équations

Ce modèle est plus complexe et il semble a priori impossible de déterminer une solution générale. Nous travaillons alors sur une solution particulière du problème sous la forme d'une onde progressive :

$$\begin{cases} \phi(t,x) = \phi_0 e^{i(\underline{k}x-\omega t)} \\ u(t,x) = u_0 e^{i(\underline{k}x-\omega t)} \\ v(t,x) = v_0 e^{i(\underline{k}x-\omega t)} \end{cases} \tag{9.29}$$

Nous obtenons la relation de dispersion suivante :

$$(\frac{\underline{k}}{k_0})^2 = (1 + \frac{\mu}{1 - i\omega\varepsilon}) \tag{9.30}$$

L'évolution des variables s'expriment ainsi de la manière suivante :

$$\begin{cases} u(t,x) = u_0 e^{i(\underline{k}x-\omega t)} \\ v(t,x) = u\,(1 - i\omega\varepsilon) \\ \phi(t,x) = \dfrac{c_0\underline{k}}{\omega} v \end{cases} \tag{9.31}$$

**Stratégie de calcul pour l'approche analytique :**
Nous calculons une solution avec un splitting de type Lie $T^t R^t U_0$ pour la variable $v$ :

$$v^{Lie}(t,x) = e^{i\underline{k}x}\left[v_0 \frac{e^{\frac{-(1+\mu)t}{\varepsilon}} + \mu}{1+\mu} + u_0 \frac{1 - e^{\frac{-(1+\mu)t}{\varepsilon}} t}{1+\mu}\right] \tag{9.32}$$

L'erreur locale de splitting est donnée par :

$$v^{Lie}(t,x) - v(t,x) = v_0 e^{i\underline{k}x}\left[\frac{e^{\frac{-(1+\mu)t}{\varepsilon}} + \mu}{1+\mu} + (1 - i\omega\varepsilon)\,\frac{1 - e^{\frac{-(1+\mu)t}{\varepsilon}}}{1+\mu} - e^{i\omega t}\right] \tag{9.33}$$

Nous avons donc :
– Pour $\frac{t}{\varepsilon} \ll 1$,

$$v^{Lie}(t,x) - v(t,x) \approx At^2 \tag{9.34}$$

où $A$ est une fonction qui dépend de $\mu$, $\varepsilon$ et de $\omega$. Pour une simulation donnée, $A$ est constant et l'erreur locale de la méthode est de 2.

– Pour $\frac{t}{\varepsilon} \gg 1$,

$$v^{Lie}(t,x) - v(t,x) \approx 1 - e^{i\omega t} \tag{9.35}$$

L'erreur locale chute à l'ordre 1. La méthode de splitting appliquée à un modèle plus fidèle au système complet dégénère bien pour $\frac{t}{\varepsilon} \gg 1$.

La même méthodologie est appliquée aux autres variables du système et pour les différentes méthodes de splitting, les résultats sont résumés en Tab.(9.5).
Pour $\frac{t}{\varepsilon} \ll 1$, on retrouve bien, pour l'ensemble des méthodes, les ordres locaux en temps théoriques à savoir un ordre 2 pour les approches de Lie et un ordre 3 pour le splitting de Strang. Pour la variable $\Phi$ et pour $\frac{t}{\varepsilon} \gg 1$, on constate une perte d'ordre uniquement pour la méthode de Strang. Pour les variables $u$ et $v$ et pour $\frac{t}{\varepsilon} \gg 1$, la perte d'ordre concerne le splitting de Lie $\mathcal{T}^t\mathcal{R}^t Q_0$ qui est d'ordre 1. Les autres stratégies de splitting sont d'ordre 2 ; on note toutefois une dépendance de l'erreur fonction de $\epsilon$. Dans la limite des petits $\epsilon$, on s'attend donc à avoir une meilleure précision avec une stratégie de Lie qui intègre l'opérateur de relaxation en dernier i.e. celui résolvant les échelles de temps les plus rapides. Avec le modèle à 5 équations, on souhaite maintenant vérifier ce comportement sur un modèle plus proche du système diphasique complet.

#### 9.3.3.3 Etude numérique du modèle à 5 équations

Bien que pouvant être intégré analytiquement, le transport du gaz et la relaxation entre phases conduisent à des calculs d'erreur de splitting particulièrement complexes. Nous adoptons alors

**TABLE 9.5** – *Récapitulatif des erreurs locales pour les différentes variables du modèle à 3 équations avec différentes stratégies de splitting*

| $\Phi$ | $\mathcal{T}^t\mathcal{R}^tQ_0$ | $\mathcal{R}^t\mathcal{T}^tQ_0$ | $\mathcal{R}^{t/2}\mathcal{T}^t\mathcal{R}^{t/2}Q_0$ |
|---|---|---|---|
| $t/\epsilon \ll 1$ | $\mathcal{O}(t^2)$ | $\mathcal{O}(t^2)$ | $\mathcal{O}(t^3)$ |
| $t/\epsilon \gg 1$ | $\mathcal{O}(t^2)$ | $\mathcal{O}(t^2)$ | $\mathcal{O}(t^2)$ |
| $v$ | | | |
| $t/\epsilon \ll 1$ | $\mathcal{O}(t^2)$ | $\mathcal{O}(t^2)$ | $\mathcal{O}(t^3)$ |
| $t/\epsilon \gg 1$ | $\mathcal{O}(t)$ | $\mathcal{O}(\epsilon t)$ | $\mathcal{O}(\epsilon t)$ |
| $u$ | | | |
| $t/\epsilon \ll 1$ | $\mathcal{O}(t^2)$ | $\mathcal{O}(t^2)$ | $\mathcal{O}(t^3)$ |
| $t/\epsilon \gg 1$ | $\mathcal{O}(t)$ | $\mathcal{O}(\epsilon t)$ | $\mathcal{O}(\epsilon t)$ |

une approche numérique en implémentant les solutions exactes de chaque sous-système au sein de fonctions indépendantes dans le code Matlab©. La configuration numérique est proche des études 1D présentées dans la première partie de ce chapitre où l'on étudie la propagation d'une onde acoustique dans un milieu diphasique au repos. Dans cette étude, nous n'imposons pas une onde acoustique au niveau d'une condition limite. Nous initialisons un profil d'onde dans le domaine puis nous le laissons se propager pendant un certain temps ; le couplage avec la phase dispersée a pour conséquence une atténuation et une dispersion de l'onde. Nous comparons l'évolution temporelle de cette perturbation acoustique calculée avec différentes stratégies de splitting au profil de l'onde obtenu avec la relation de dispersion du modèle à 5 équations. Nous travaillons ici sur des erreurs globales en temps i.e. obtenues au cours d'un nombre suffisamment grand d'itérations. Les paramètres physiques et numériques de cette étude sont les suivants : le taux de chargement $\mu = 0.4$, les temps de relaxation $\tau_u = \tau_T = 10^{-6}$s (équivalent à $\epsilon$ pour les autres modèles), une fréquence de l'onde étudiée de 1000Hz, une vitesse du son $c_0$ de 1000m/s. Le nombre de Stokes des gouttes composant la phase dispersée est égal à $10^{-3}$. Le temps simulé avant de comparer la solution analytique et celles obtenues avec les différentes stratégies de splitting est égal à $60\tau_u$. Notons que dans cette analyse, nous étudions des erreurs globales alors que pour les modèles à 1 et à 3 équations, nous avons déterminé des erreurs établies sur un pas de temps.

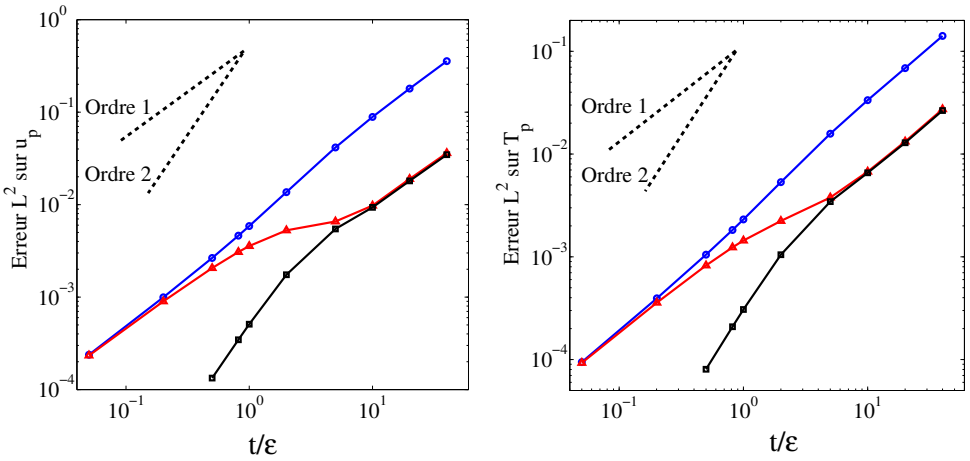


**FIGURE 9.10** – *Ordres des erreurs globales calculées à partir d'une norme $L^2$ sur les variables $u_p$ (à gauche) et $T_p$ (à droite). Résultats pour le splitting de Lie $\mathcal{T}^t\mathcal{R}^tQ_0$ : ∘, pour le splitting de Lie $\mathcal{R}^t\mathcal{T}^tQ_0$ : △ et pour le splitting de Strang : □*

Comme présenté dans les Fig.(9.10)&(9.11), on retrouve les mêmes résultats qu'avec le modèle à 3 équations. Pour $\frac{t}{\varepsilon} \ll 1$, l'ordre en temps est égal à 1 pour les méthodes de Lie et vaut 2 pour le splitting de Strang. Pour le splitting de Lie $\mathcal{T}^t\mathcal{R}^tQ_0$, on remarque qu'il n'y a pas de perte d'ordre pour $\frac{t}{\varepsilon} \gg 1$. Pour le splitting de Lie $\mathcal{R}^t\mathcal{T}^tQ_0$, la situation est plus atypique car nous constatons un ordre inférieur à 1 pour $\frac{t}{\varepsilon} \approx 1$ puis un retour à l'ordre 1 pour $\frac{t}{\varepsilon} \gg 1$. Cela a pour conséquence un niveau d'erreur inférieur avec la stratégie de Lie intégrant l'opérateur de relaxation en dernier plutôt que l'opérateur de transport. Cette analyse confirme que l'intégration de l'opérateur caractérisé par les temps caractéristiques les plus courts doit être préférentiellement intégré en dernier. Pour le splitting de Strang, on relève un passage de l'ordre de 2 à l'ordre 1 pour $\frac{t}{\varepsilon} \approx 1$ et quand on tend vers $\frac{t}{\varepsilon} \gg 1$. Notons que le niveau d'erreur entre le splitting de Lie $\mathcal{R}^t\mathcal{T}^tQ_0$ et de Strang est

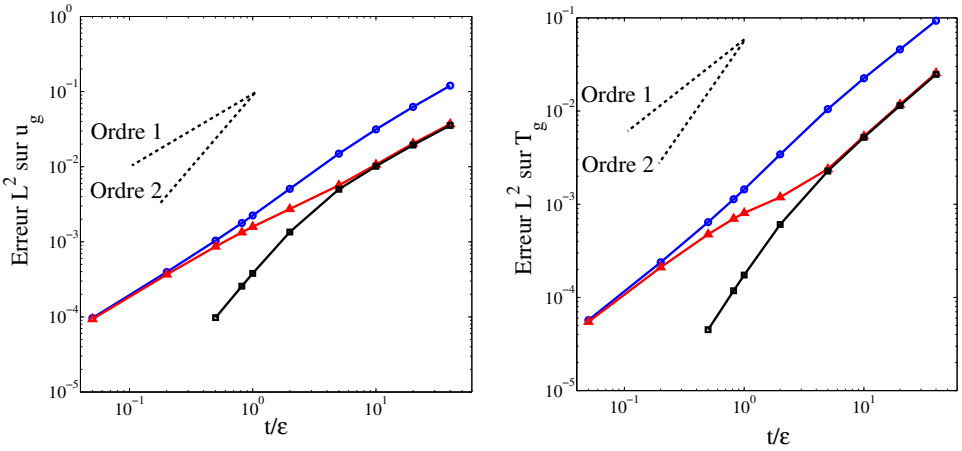


**FIGURE 9.11** – *Ordres des erreurs globales calculées à partir d'une norme $L^2$ sur les variables $u_g$ (à gauche) et $T_g$ (à droite). Résultats pour le splitting de Lie $\mathcal{T}^t\mathcal{R}^tQ_0$ : ○, pour le splitting de Lie $\mathcal{R}^t\mathcal{T}^tQ_0$ : △ et pour le splitting de Strang : □*

le même pour $\frac{t}{\varepsilon} \gg 1$.

### 9.3.4 Conclusion sur l'erreur de splitting pour les systèmes linéaires

De l'analyse des différents modèles, deux points ressortent :

– Dans la première partie de ce chapitre, nous avions fait l'hypothèse que l'erreur constatée sur $\alpha^*$ était liée au principe même de la méthode de splitting. Cela est confirmé ici du point de vue mathématique. Les calculs du modèle à 1 équation souligne le problème suivant : une variable $u$ évaluée dans sa phase de relaxation ne suit pas l'évolution du champ $\phi$ avec lequel elle est couplée. Autrement dit, lors de la phase de relaxation des particules, l'évolution du champ gazeux n'est pas prise en compte.

– La dégénérescence de la méthode de splitting a également été démontrée en régime d'acoustique linéaire pour différents systèmes couplés. Elle est observable sur les cas d'étude 1D acoustique que nous avons réalisés. La chute en ordre de la méthode est confirmée pour $\frac{t}{\varepsilon} \gg 1$. Cette perte de précision se constate dans la limite des nombres de Stokes petits i.e. des petites particules présentant des temps de relaxation courts. La comparaison des différentes méthodes de splitting est très instructive car elle met en évidence qu'une intégration se terminant par l'opérateur présentant les échelles temporelles les plus rapides conduit à réduire la perte de précision dans le régime $\frac{t}{\varepsilon} \gg 1$.

## Conclusion du chapitre 9

Les validations acoustiques diphasiques 1D ont mis en évidence la pertinence de la stratégie de splitting pour restituer avec précision le couplage entre la phase gazeuse et la phase condensée, que cette dernière soit inerte, évaporante ou encore composée de gouttes bicomposantes. L'emploi d'un pas de temps basé sur le temps de propagation acoustique assure des résultats très satisfaisants vis-à-vis de l'atténuation et de la dispersion des ondes acoustiques dans un contexte linéaire. Une erreur intrinsèque à la méthode de séparation d'opérateurs est toutefois notable dans la limite des petits nombres de Stokes et quand le pas de temps est plus grand que les temps de relaxation les plus rapides. L'analyse mathématique de l'erreur de splitting confirme une perte d'ordre des méthodes de splitting quand le pas de temps devient trop grand. Pour des nombres de Stokes tendant vers 0, notons qu'il s'agit d'un régime pour lequel l'impact des particules est faible ; les conséquences sur la propagation des perturbations acoustiques sont donc limitées. Un des résultats majeurs de cette étude est qu'intégrer en dernier l'opérateur présentant les échelles de temps les plus rapides du système réduit la perte de précision pour $\frac{t}{\varepsilon} \gg 1$. Nous recommandons ainsi d'utiliser le splitting de Lie dans sa version $\mathcal{R}^t\mathcal{T}^tQ_0$ plutôt que dans la version $\mathcal{T}^t\mathcal{R}^tQ_0$.
Une étude plus poussée de l'erreur de splitting dans un contexte non linéaire serait intéressante dans la mesure où les ondes acoustiques au sein des MPS présentent souvent des amplitudes relatives assez élevées. Il serait également instructif de poursuivre l'analyse de l'erreur de splitting dans un contexte où les transferts de masse sont pris en compte.

Quatrième partie

# Simulations diphasiques réactives avec le code CEDRE

# Chapitre 10

# Contribution dans le code multi-physique CEDRE

*Dans ce chapitre introductif aux simulations diphasiques réactives réalisées avec le code CEDRE, nous présentons d'une part la plateforme multi-physique CEDRE et d'autre part les contributions à l'implémentation des méthodes développées au cours de cette thèse. Le premier point est une illustration de la structure globale de la chaîne de calcul CEDRE et des stratégies numériques adoptées pour constituer l'architecture du code. On souligne les points forts du code tels que le traitement des maillages non structurés généraux et une structure algorithmique performante pour réaliser des calculs massivement parallèles. La seconde partie constitue un axe important de ces travaux de thèse car elle met en lumière l'intégration des développements proposés dans les chapitres précédents. L'ensemble de ces améliorations s'inscrivent dans une logique de pérennisation du code (ou code legacy en anglais) i.e. proposer des méthodes innovantes, facilement implémentables et modifiables pour intégrer de nouvelles stratégies sans que la structure du code ne soit fortement impactée.*

## 10.1 Présentation du code CEDRE

### 10.1.1 Structure globale

On présente ici la chaîne de calcul CEDRE© de façon générale, CEDRE étant une plateforme multi-physique destinée à faire progresser la recherche mais aussi à traiter des applications industrielles dans le domaine de l'énergétique et de la propulsion. Cette chaîne inclut une interface homme-machine pour la mise en données mais aussi un ensemble d'utilitaires de pré et post-traitement.
Comme présenté en Fig.(10.1), l'environnement logiciel du code CEDRE suit la logique suivante : une création des CAO et des maillages via essentiellement des outils extérieurs puis une conversion au format CEDRE. Le module de pré-traitement géométrique EPINETTE assure entre autres le redimensionnement éventuel de la géométrie, le raffinement ou le déraffinement total ou partiel du maillage via des volumes de contrôle et enfin le découpage en domaines pour la mise en place du calcul parallèle. Il contient également un mailleur élémentaire capable de générer des maillages cartésiens en géométrie bidimensionnelle ou tridimensionnelle. La mise en données i.e. le choix des modèles physiques, des schémas numériques et des conditions initiales et aux limites s'effectue via l'interface graphique EPICEA. Le pilotage du pas de temps et de la fréquence des sorties est également réalisé au sein de cette interface. Finalement, le post-traitement des données brutes s'effectue avec le module EXPLORE qui les convertit en données exploitables par un logiciel commercial tel que Tecplot©.
L'ensemble de ces éléments est constamment mis à jour afin que le tout forme une chaîne cohérente quelles que soient les versions du code. D'anciennes mises en données doivent pouvoir être relues par des versions plus récentes d'EPICEA puis lancées par CEDRE à condition que la fonctionnalité n'ait pas été abandonnée entre-temps.
La stratégie de développement du code CEDRE s'organise autour d'un logiciel de gestion de configuration. Ce dernier assure la pérennité du code en conservant les anciennes versions et une traçabilité de l'ensemble des développements. Au quotidien, chaque développeur travaille sur une base CEDRE qui lui est propre et soumet ses développements pour la prochaine version. L'accent est mis sur la constitution d'une base de non-régression. Chaque développement est alors confronté à

cette base, anticipant ainsi des changements non désirés sur d'autres parties du code. Le processus de validation quant à lui s'appuie sur une base de cas tests, enrichie au fil du temps, permettant de juger de la qualité des résultats et de justifier la maturité du code.

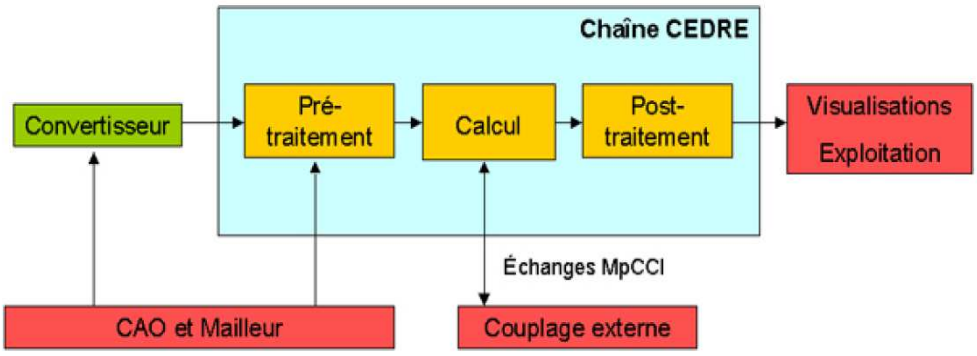


**FIGURE 10.1** – *Environnement logiciel du code CEDRE*

Le code est organisé autour d'un ensemble de solveurs, chacun permettant de traiter une physique particulière, ces solveurs étant couplés si besoin pour la réalisation de calculs complexes. On présente de façon succincte les solveurs :

- Le solveur CHARME assure l'étude des écoulements fluides régis par les équations de Navier-Stokes compressibles et multi-espèces. Une approche Euler est également possible. Il traite des écoulements réactifs et son domaine d'utilisation couvre les écoulements subsoniques et supersoniques.
- Les solveurs SPIREE et SPARTE décrivent la phase dispersée respectivement par des approches eulérienne et lagrangienne.
- Le solveur FILM est basé sur les équations de Saint-Venant pour l'étude des ruissellements de films liquides sur les parois.
- Le solveur PEUL concerne l'étude de la formation et le suivi des polluants par une approche lagrangienne.
- Les solveurs ASTRE et REA portent sur l'étude des transferts radiatifs. L'équation de transfert radiatif est résolue avec une approche intégrale de type Monte-Carlo avec ASTRE. Elle est traitée sous forme différentielle par une méthode aux ordonnées discrètes avec REA [Tessé and Lamet, 2011].

Il est possible d'utiliser d'autres logiciels pour traiter des physiques qui ne relèvent pas de l'énergétique comme par exemple la mécanique, au travers de couplages externes via une bibliothèque développée en interne CWIPI.

### 10.1.2 Stratégies numériques et spécificités de CEDRE

Les solveurs eulériens CHARME et SPIREE sont basés sur une discrétisation des équations de transport par la méthode des Volumes Finis et un stockage des variables de type "cell-center" c'est-à-dire aux centres des cellules. Afin d'être pertinent sur tout type de configuration industrielle et d'écoulement, le choix de développer des méthodes numériques adaptées aux maillages non structurés généraux fut un choix capital. Le traitement de ce type de maillages est détaillé dans [Le Touze, 2015; Courbet et al., 2011; Leterrier, 2003]. Comme expliqué au chapitre 7, le besoin en robustesse et l'utilisation sur différents maillages ont conduit à travailler avec des méthodes MUSCL précises à l'ordre 2 avec un calcul de flux numériques décentrés. Une amélioration de ces approches pour les écoulements présentant de forts rapports de densité a dernièrement été proposée grâce à l'introduction d'une méthode multipente associée à un limiteur garantissant le principe du maximum [Le Touze et al., 2015]. Cette nouvelle technique a d'abord été implémentée dans le solveur SPIREE. Tous les calculs réalisés dans les chapitres suivants utilisent cette nouvelle approche. Elle a ensuite été introduite dans le solveur CHARME en vue de simulations d'écoulements à plusieurs fluides non miscibles, et donc en première approche pour l'étude d'écoulements à phase séparées [Le Touze, 2015]. En parallèle, des schémas permettant une montée en ordre élevé ont été proposés [Haider, 2009]. Ils sont en phase finale de développement et de validation. Ils sont évidemment plus coûteux mais apportent un gain en précision non négligeable, en particulier pour des études d'acoustique.

Différentes stratégies d'intégration temporelle sont envisageables pour les deux solveurs eulériens

en fonction des applications. Pour l'analyse des écoulements externes stationnaires comme celui autour d'un profil NACA ou pour l'établissement d'un écoulement moyen au sein d'un moteur à propergol solide, un schéma implicite est privilégié. Pour l'étude de phénomènes transitoires, l'approche explicite est recommandée. Les schémas accessibles dans CHARME montent à l'ordre 4 et à l'ordre 2 pour SPIREE. Dans un contexte d'études multi-physiques, la structure multi-solveur du code est un atout mais il est nécessaire d'adopter une stratégie de couplage pertinente. A haut niveau dans le code i.e. dans sa routine d'avancement en temps, il a été prévu un pilotage adéquat des appels aux différents solveurs et à des routines d'échanges dédiées aux couplages entre ces derniers. Cette logique de couplage interne commandable depuis l'interface EPICEA est une force car elle rend le code modulaire, et donc plus facilement modifiable. De plus, en fonction des échelles de temps caractéristiques du problème étudié, cette stratégie conduit à des choix judicieux des schémas temporels en termes de robustesse et de précision. L'approche modulaire est également appréciable du point de vue de la discrétisation spatiale et des méthodes numériques associées. Ainsi, pour chaque solveur, la possibilité de combiner des méthodes d'intégration temporelle et spatiale offre une maîtrise plus aisée des coûts des simulations et une plus grande flexibilité vis-à-vis des contraintes numériques imposées par les phénomènes physiques à décrire. Ce point souligne une des philosophies de CEDRE à savoir proposer un ratio coût/précision attractif pour des configurations complexes. Pour les études d'écoulements diphasiques, la partie III justifie l'emploi d'une méthode de séparation d'opérateurs. Ce chapitre illustre son implémentation dans la logique d'avancement en temps de CEDRE pour améliorer le couplage CHARME-SPIREE.

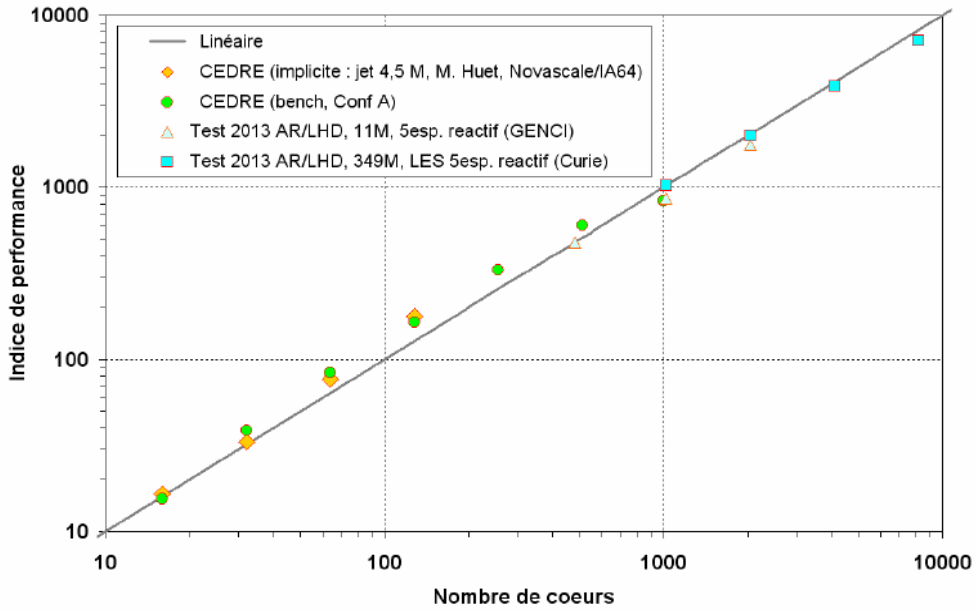


**Figure 10.2** – *Etude de la scalabilité du code CEDRE [Vuillot and Refloch, 2014]*

Un des avantages majeurs de CEDRE est le choix d'une structure algorithmique performante pour réaliser des calculs massivement parallèles. La gestion des échanges de données entre domaines spatiaux d'un maillage donné sur plusieurs noeuds de calcul est régie par le protocole MPI. C'est une stratégie qui est partagée par une très grande majorité de développeurs de codes CFD mais qui ne garantit pas une linéarité entre le nombre de processeurs utilisé et l'amélioration de l'indice de performance. Ce dernier est le rapport entre le temps CPU d'un calcul réalisé avec un processeur sur celui effectué avec N fois plus de processeurs. On parle alors de "scalabilité" du code (scalability en anglais). De ce point de vue, le code CEDRE est particulièrement performant comme l'illustre la Fig.(10.2) ; celui-ci conserve une linéarité proche de 1 une fois passé le millier de coeurs. Si les développements de cette thèse ne concernent pas directement les choix faits sur la parallélisation du code, ils s'inscrivent complètement dans la logique du Calcul Haute Performance (ou HPC en anglais). Les développements implémentés dans le code respectent sa structure parallèle.

## 10.2 Apports et implémentation des développements dans CEDRE

Cette partie est consacrée à la présentation des développements de thèse implémentés dans le code CEDRE. En Fig.(10.3), nous mettons en évidence les améliorations majeures apportées entre deux versions officielles du code et réalisées au travers de travaux communs. Faisant écho aux deux thèmes abordés respectivement dans les parties II et III de ce travail, ces développements portent sur : 1- l'enrichissement de la modélisation de la phase dispersée dans le solveur SPIREE 2- l'amélioration du couplage gaz-particules au travers du couplage entre CHARME et SPIREE.
Lors de la prise en main de la version 4.1 de CEDRE, l'état de l'art était le suivant pour le solveur SPIREE : une méthode MC pour les gouttes inertes et évaporantes et une méthode MF disponible uniquement pour les gouttes inertes. L'approche exponentielle était proposée pour décrire les distributions au sein des sections. Le schéma de transport de la phase dispersée était disponible à l'ordre 1 et à l'ordre 2 mais ce dernier présentait de nombreux problèmes de robustesse, le rendant difficilement utilisable pour des configurations présentant de forts gradients de fraction volumique comme expliqué dans §7.2.3. Enfin, le couplage temporel CHARME-SPIREE suivait une intégration phase-par-phase (cf. §7.1) peu robuste et manquant de précision sur des cas particulièrement complexes comme les interactions spray-acoustique (cf. §9.2 et [Doisneau et al., 2014]).
Un effort conséquent a été consacré à l'implémentation de ces développements dans le code CEDRE. Il est important de préciser qu'avant leur intégration, ils ont passé une première étape de validation et de vérification via les calculs menés avec le code SAP1 présenté dans §9.1. De plus, l'ensemble des développements a respecté une méthodologie stricte consistant à créer un cas de non-régression pour chaque modification majeure et à proposer une évolution de l'interface EPICEA si nécessaire.

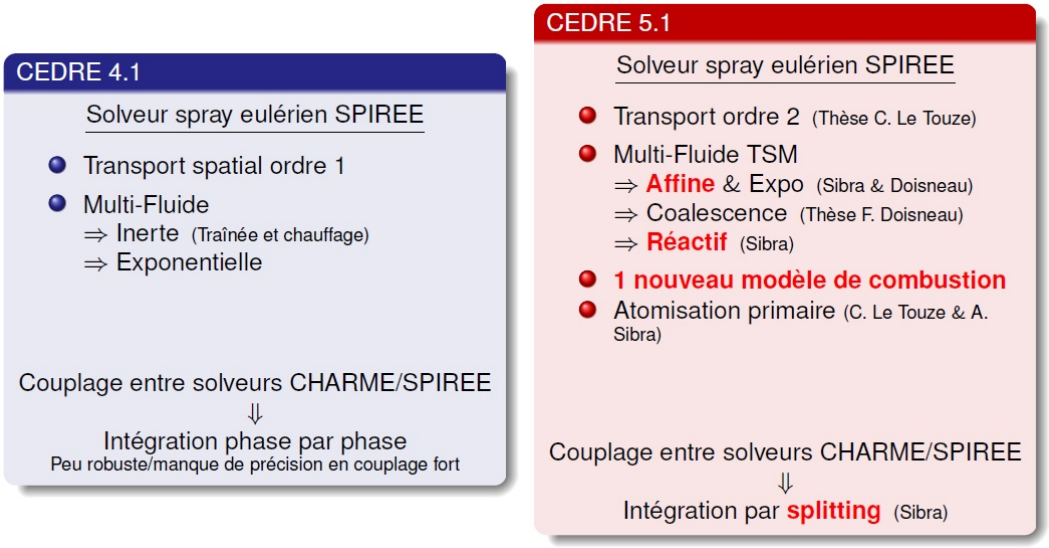


**FIGURE 10.3** – *Evolution du solveur phase dispersée eulérien SPIREE entre les versions 4.1 et 5.1 de CEDRE*

Dans la version 5.1 de CEDRE sur laquelle le travail d'implémentation a été réalisé, on retrouve pour les développements liés à cette thèse :
– L'approche affine pour la reconstruction au sein des sections de la méthode TSM-MF
– L'intégration des termes sources réactifs pour l'évaporation et la combustion des gouttes
– Un nouveau modèle de combustion des gouttes d'aluminium
– Un couplage CHARME-SPIREE par une stratégie d'intégration par splitting d'opérateurs
D'autres avancées sont notables ; elles sont à relier à ce travail de thèse soit parce qu'elles ont contribué à améliorer la qualité et la robustesse des calculs applicatifs proposés dans les chapitres suivants soit plus directement car elles ont fait l'objet d'un travail commun. Le développement d'un schéma de transport à l'ordre 2 pour la phase dispersée [Le Touze et al., 2015] est une contribution majeure au solveur SPIREE. Les travaux menés respectivement par F. Doisneau et C. Le Touze sur la coalescence des gouttes et l'atomisation primaire de jets liquides ont permis de rendre accessible au sein du solveur eulérien des modèles de gouttes jusqu'à ce jour uniquement disponibles dans le solveur lagrangien SPARTE. De nombreuses analyses et évaluations restent toutefois à mener. Dans cette optique, il serait bénéfique de proposer des comparaisons numériques entre les deux

solveurs.
Dans les paragraphes suivants, on illustre la logique d'implémentation des développements de thèse en trois points : 1- la stratégie de splitting pour le couplage CHARME-SPIREE 2- les avancées sur la méthode MF et la résolution des termes sources 3- le travail commun pour le couplage CHARME-SPIREE pour l'atomisation primaire.

### 10.2.1 Mise en place de la stratégie de splitting pour le couplage CHARME-SPIREE

Nous choisissons d'aborder en premier le couplage entre solveurs car il fut chronologiquement le premier travail réalisé, en collaboration avec F. Doisneau [Doisneau et al., 2014] mais aussi car il impacte l'ensemble des développements présentés par la suite. Dans cette partie, nous décrivons du point de vue fonctionnel la manière dont la stratégie de splitting a été implémentée et comment elle structure le code par rapport à l'ancienne intégration temporelle. Nous soulignons par la suite l'impact de ce développement sur la version actuelle du code et ses versions à venir.
Comme illustré en Fig.(10.4), l'intégration phase-par-phase proposée dans CEDRE 4.1 reposait sur un appel successif aux solveurs CHARME et SPIREE (Call CHARME() et Call SPIREE()) dans la routine d'avancement en temps. Au sein de ces derniers, une résolution de systèmes de lois de conservation avec termes sources était effectuée. Ne calculant pas l'évolution des variables du solveur non appelé, l'évaluation des termes sources de couplage était imparfaite puisqu'elle suppose les variables d'une des phases constantes. Cette logique s'applique à nouveau pour la résolution du second solveur. Notons que le pas d'intégration $\Delta t$ appliqué à chaque solveur correspond au pas de temps choisi par l'utilisateur pour réaliser son calcul couplé.

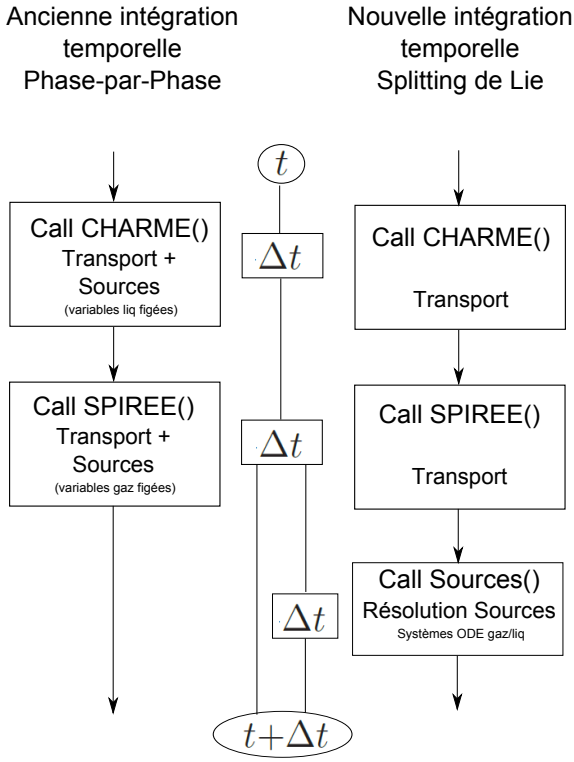


**FIGURE 10.4** – *Nouvelle intégration temporelle avec une stratégie de splitting d'opérateurs dans la routine de cycle en temps de CEDRE, exemple avec un splitting de Lie*

L'intégration par une technique de séparation d'opérateurs repose sur un travail des appels aux solveurs et à la mise en place d'une routine dédiée en tant qu'opérateur d'échanges entre le gaz et les gouttes. L'appel aux solveurs CHARME et SPIREE suit la même stratégie que l'intégration phase-par-phase mais ils ne résolvent plus de termes sources. Notons que l'ordre d'appel des solveurs n'a plus d'importance car chaque phase évolue indépendamment l'une de l'autre comme illustré par les systèmes Eq.(7.1)&(7.2). Nous introduisons ensuite la routine Sources (Call Sources()) pour les termes sources assurant les échanges de masse, de quantité de mouvement et d'énergie entre le gaz et les gouttes. Ces derniers correspondent aux termes de traînée, d'échange de chaleur mais également aux transferts de masse et d'énergie par évaporation des gouttes. Comme présenté dans l'Eq.(7.3), il s'agit de résoudre dans cet opérateur une collection de systèmes d'ODE reliant

l'évolution des variables du gaz à celles des gouttes. Au sein de la routine Sources, plusieurs schémas d'intégration ont été implémentés : une méthode d'Euler à N sous-itérations, un RK2-TVD et un RK3-TVD. La stratégie présentée dans la Fig.(10.4) représente un splitting de Lie, et donc une intégration temporelle globale d'ordre 1. Démontré pour le cas des gouttes inertes dans §9.3, le choix d'appeler la routine Sources en dernier opérateur est la stratégie la plus pertinente pour intégrer des phénomènes dont les échelles de temps sont les plus courtes (cf. §7.1.1). Dans la routine d'avancement en temps, nous avons également rendu possible le choix d'un splitting de Strang d'ordre 2. Dans ce cas, l'appel aux opérateurs commence par la routine Sources avec une résolution sur un pas de temps $\Delta t/2$, suivi par la résolution des transports gaz et liquide sur un pas de temps $\Delta t$ et finalement par un second appel à la routine Sources toujours avec un demi-pas de temps.
Du point de vue du développement du code CEDRE et de l'amélioration de la stratégie de couplage CHARME-SPIREE, l'implémentation de la technique de splitting représente une amélioration à différents niveaux :

1. Le gain en robustesse et en précision par rapport à l'ancienne intégration temporelle. Une première évaluation de la stratégie de splitting a été proposée dans la Partie III avec le code de recherches SAP1. Cette analyse est confirmée avec CEDRE dans les chapitres suivants au travers de calculs diphasiques réactifs réalisés pour des configurations MPS.
2. L'impact en termes de codage. En effet, l'utilisateur reste libre de choisir les mêmes schémas temporels et de transport qu'auparavant au sein des solveurs CHARME et SPIREE. Ce point est important car il souligne la flexibilité de la technique de splitting à savoir la facilité d'implémentation et la pérennisation des méthodes déjà existantes. Fort de l'expérience acquise pour le couplage CHARME-SPIREE, il n'est pas exclu d'appliquer cette stratégie pour les autres solveurs de CEDRE.
3. L'impact sur le parallélisme et les futurs développements visant à garantir le potentiel HPC du code. La méthode de séparation d'opérateurs est compatible avec une décomposition spatiale tel que requis par le protocole MPI. Dans le contexte des problèmes de réaction-diffusion [Descombes et al., 2015], la technique de splitting, combinée à des méthodes de résolution temporelle d'ordre élevé pour chaque opérateur et à une stratégie de discrétisation spatiale adaptative, a démontré son potentiel pour des calculs parallèles. Dans cette étude, les auteurs ont mis l'accent sur l'optimisation de la charge de calculs sur des architectures massivement parallèles en développant une programmation hybride. Cette dernière mêle les aspects MPI en procédant à une décomposition en domaines pour le parallélisme à mémoire partagée sur les différents coeurs avec une répartition OpenMP des opérations indépendantes au sein d'un coeur. Pour l'approche Euler-Euler proposée dans cette thèse, de nombreuses opérations sont locales en espace tel que le calcul des coefficients de la reconstruction MF. La décomposition "classique" en domaines ne garantit pas une optimisation de la charge calcul au sein d'un domaine. L'idée de répartir équitablement la charge au sein d'un coeur pour un domaine donné est donc appropriée. La séparation d'opérateurs s'inscrit dans cette logique en décomposant le problème global en sous-problèmes indépendants pour lesquels la charge machine est exploitée au mieux. Cela est particulièrement adéquat pour l'intégration des termes de couplage de la routine Sources que nous décrivons dans la partie suivante. La mise en place d'une programmation hybride dans CEDRE est à l'étude. Une première phase d'évaluation pour l'approche Euler-Euler des systèmes diphasiques couplés est proposée par V. Dupif [Dupif et al., 2015a].

### 10.2.2 Evolution de l'approche sectionnelle, calcul et intégration des termes sources

Le développement principal repose ici sur la mise en place d'une reconstruction affine plutôt qu'exponentielle pour l'approche sectionnnelle. Du point de vue de l'implémentation, il ne représente pas de difficultés majeures car il ne porte que sur le choix de la méthode affine ou exponentielle à différents niveaux dans le code et à l'implémentation de routines de calcul des coefficients affines pour chaque section comme présenté dans l'algorithme du paragraphe §5.1.2.2. Avec la méthode de splitting, l'appel à ces routines (Calcoeff_expo() et Calcoeff_affine()) n'est réalisé que dans l'opérateur Sources comme illustré dans la Fig.(10.5). En effet, les reconstructions sectionnelles ne sont pas utilisées dans la phase de transport où seuls le nombre et la masse des gouttes importent. Les coefficients de la reconstruction sont employés pour le calcul des termes sources comme expliqué dans §5.1.2.4.
Au sein de la routine Sources, le calcul des termes sources est accessible pour l'ensemble des modèles

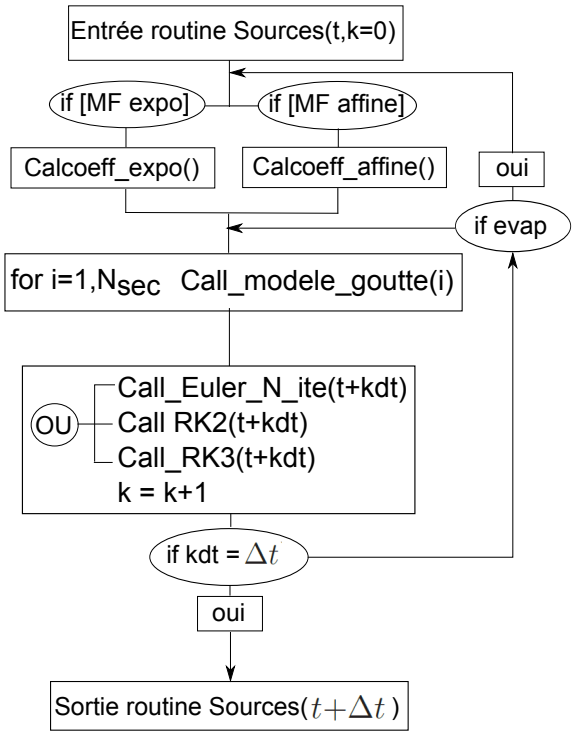


**FIGURE 10.5** – *Principe général de la routine Sources pour les échanges CHARME-SPIREE pour les méthodes MF exponentielle et affine et les différents schémas d'intégration temporelle*

inertes et d'évaporation disponibles dans le code CEDRE et présentés dans §3.4. Les modèles de combustion sont aussi utilisables à l'exception du nouveau modèle de diffusion proposé dans §2.4.2 qui s'applique uniquement pour la méthode Multi-Classe. Pour l'ensemble des modèles à l'échelle de la goutte, les calculs intra-sectionnels des termes sources sont fournis dans l'Annexe A. Une fois les termes sources évalués, un schéma d'intégration est choisi pour les intégrer et faire évoluer simultanément les variables gaz et liquides. A chaque pas d'intégration intermédiaire comme cela est le cas pour les méthodes Runge-Kutta, les modèles à l'échelle de la goutte sont appelés avec les valeurs réactualisées du gaz et des gouttes. Pour l'étude des gouttes en évaporation (valable également pour la coalescence), un appel aux routines de calculs des coefficients sectionnels est nécessaire car la distribution a évolué. Notons qu'il y autant d'appels aux modèles de gouttes et aux coefficients sectionnels que de sections utilisées pour décrire l'espace des tailles. L'utilisation d'un nombre limité de sections reste un enjeu important et justifie l'emploi d'une méthode MF à deux moments en taille comme expliqué dans §4.2.3.
La description fonctionnelle de la routine Sources souligne le nombre conséquent d'opérations indépendantes effectuées localement ; cette opération est donc répétée sur l'ensemble des cellules du maillage. Le calcul des coefficients de la méthode MF, des termes sources au sein des appels aux modèles à l'échelle de la goutte, le tout multiplié par le nombre de sections conduit à une intensité arithmétique importante. Cette dernière justifie le développement d'une programmation hybride qui assurerait une amélioration majeure dans le contexte HPC. La décomposition en domaines est assurée par le protocole MPI sur les différents coeurs de calcul, puis les opérations indépendantes au sein d'un domaine sont alors équitablement réparties via une approche OpenMP dynamique.
**N.B**. Tous les développements portant sur la stratégie de splitting ainsi que sur l'intégration des termes sources sont entièrement disponibles pour la méthode MC. La routine Sources est cependant simplifiée car elle ne fait pas appel aux calculs des coefficients sectionnels et la détermination des termes sources ne nécessite pas d'intégration sur les sections.

### 10.2.3 Contribution commune pour le couplage CHARME-SPIREE : étude de l'atomisation primaire en propulsion liquide

Les simulations d'atomisation de jets liquides au sein des moteurs-fusées cryotechniques proposées dans [Le Touze, 2015] ont nécessité d'importants développements au sein du code CEDRE. La démarche adoptée fut la mise en place d'une stratégie de couplage entre une modélisation adaptée aux écoulements diphasiques à phases séparées et celle requise pour la phase dispersée. Une approche de type interface diffuse a été choisie afin de décrire les phases séparées via le solveur

CHARME. Quant à la phase dispersée, elle est résolue avec le solveur SPIREE. C. Le Touze s'est alors intéressé au couplage entre les solveurs CHARME et SPIREE via l'introduction de termes de transfert liquide-liquide. Ce travail a consisté à formuler ces termes pour les échanges de masse, de quantité de mouvement et d'énergie. Les développements concernent autant le modèle Multi-Classe que le modèle Multi-Fluide. Nous les présentons ici pour la formulation MF. La contribution de chacun à ce développement se retrouve dans les quatre étapes suivantes :

- La modélisation du transfert par atomisation primaire en fonction des conditions locales de l'écoulement (C. Le Touze).
- La détermination des propriétés des gouttes atomisées (C. Le Touze).
- Un algorithme de répartition des termes sources en fonction de la distribution en taille des gouttes créées (A. Sibra).
- Une stratégie d'intégration temporelle des termes de couplage CHARME-SPIREE (A. Sibra).

La modélisation du terme de transfert de masse par atomisation primaire, noté $A_M^{liq}$, détermine la masse par unité de volume et temps appartenant à la phase séparée liquide modélisée dans le solveur CHARME qui est transférée vers SPIREE.

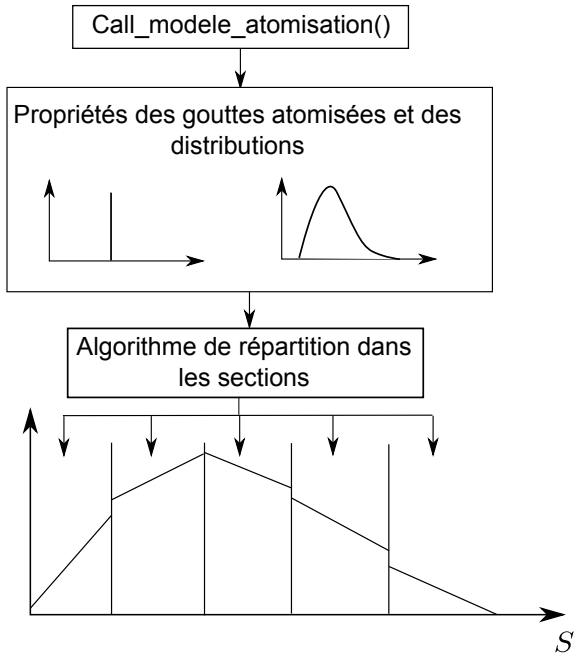


**FIGURE 10.6** – *Stratégie globale du transfert de gouttes atomisées de CHARME vers SPIREE pour la méthode MF affine*

La modélisation ne se limite pas à déterminer la masse de liquide à transférer vers SPIREE mais aussi à évaluer les distributions en taille, les vitesses et les températures des gouttes atomisées. Les conditions locales (nombres de Reynolds, nombres de Weber...) étant très différentes selon les zones de l'écoulement et en fonction du temps, la détermination des distributions en taille et des propriétés thermodynamiques des gouttes présente certaines difficultés. On ne détaille pas ici les détails de modélisation choisie dans CEDRE ; ces derniers sont présentés dans [Le Touze, 2015]. On s'intéresse plus à la stratégie mise en place pour intégrer un modèle d'atomisation quelconque et assurer les échanges entre CHARME-SPIREE :

- La Fig.(10.6) schématise la stratégie adoptée afin de rendre facile l'implémentation de différents modèles d'atomisation. Ces derniers doivent fournir la masse de liquide atomisée ainsi que la distribution pour chaque cellule du maillage. La répartition en taille fournie par le modèle, qu'elle soit continue ou discontinue, n'est pas limitant avec la méthode MF dans la mesure où elle couvre l'ensemble des tailles de gouttes. Une fois la distribution déterminée, nous avons mis en place un algorithme de répartition au sein des sections. Quand la distribution est un Dirac, le résultat est direct car il suffit de rattacher la taille correspondante à la gamme de tailles définie par les sections fixes de la méthode MF. Quand il s'agit d'une distribution continue, le principe consiste à appliquer la même discrétisation en taille que la méthode MF afin de calculer les nombres et les masses qui devront être affectés à chaque section. Le système Eq.(10.1) traduit

cela par l'introduction de termes sources d'atomisation pour une section $k$.

$$\left\{\begin{array}{lll} \partial_t n^{(k)} + \partial_{\mathbf{x}}.(n^{(k)}\mathbf{u^{(k)}}) & = \mathcal{N}^{(k+1)} - \mathcal{N}^{(k)} & + \mathrm{A}_N^{(k)} \\ \partial_t m^{(k)} + \partial_{\mathbf{x}}.(m^{(k)}\mathbf{u^{(k)}}) & = \left(\mathcal{E}^{(k+1)} - \mathcal{E}^{(k)}\right) - \mathrm{M}^{(k)} & + \mathrm{A}_M^{(k)} \\ \partial_t (m^{(k)}\mathbf{u^{(k)}}) + \partial_{\mathbf{x}}.(m^{(k)}\mathbf{u^{(k)}} \otimes \mathbf{u^{(k)}}) & = \left(\mathcal{E}^{(k+1)}\mathbf{u^{(k+1)}} - \mathcal{E}^{k}\mathbf{u^{(k)}}\right) - \mathrm{M}^{(k)}\mathbf{u^{(k)}} + \mathbf{F^{(k)}} & + \mathrm{A}_U^{(k)} \\ \partial_t (m^{(k)}h^{(k)}) + \partial_{\mathbf{x}}.(m^{(k)}h^{(k)}\mathbf{u^{(k)}}) & = \left(\mathcal{E}^{(k+1)}h^{(k+1)} - \mathcal{E}^{(k)}h^{(k)}\right) - \mathrm{M}^{(k)}h^{(k)} + \mathrm{H}^{(k)} & + \mathrm{A}_E^{(k)} \end{array}\right. \tag{10.1}$$

Les termes de quantité de mouvement $\mathrm{A}_U^{(k)}$ sont évalués soit par un modèle d'atomisation très avancé si celui-ci détermine des distributions en vitesse soit plus simplement si l'approche consiste à choisir une seule vitesse pour les gouttes créées. Dans le premier cas, on applique la même stratégie de discrétisation en sections sur les distributions en vitesse que celle réalisée sur les tailles pour calculer une quantité de mouvement moyenne, et donc une vitesse moyenne des nouvelles gouttes dans chaque section. Dans le cas d'une même vitesse pour l'ensemble de la distribution créée, le calcul est direct car il s'agit de multiplier cette vitesse par la masse des gouttes à ajouter dans chaque section. Finalement, les termes sources sur l'énergie $\mathrm{A}_E^{(k)}$ suivent la même logique ; on laisse le lecteur se référer à la thèse de C. Le Touze pour plus de détails concernant la thermodynamique des ergols utilisés en propulsion liquide. Afin que le couplage CHARME-SPIREE soit parfaitement conservatif, on s'assure que l'ensemble des termes sources appliqués aux sections soient retranchés au système gaz comme souligné par le système Eq.(10.2).

$$\left\{\begin{array}{ll} \mathrm{A}_N^{liq} = \sum_{k=1}^{\mathrm{N_{sec}}} \mathrm{A}_N^{(k)} & \mathrm{A}_M^{liq} = \sum_{k=1}^{\mathrm{N_{sec}}} \mathrm{A}_M^{(k)} \\ \mathrm{A}_U^{liq} = \sum_{k=1}^{\mathrm{N_{sec}}} \mathrm{A}_U^{(k)} & \mathrm{A}_E^{liq} = \sum_{k=1}^{\mathrm{N_{sec}}} \mathrm{A}_E^{(k)} \end{array}\right. \tag{10.2}$$

– Le second axe de travail pour le couplage CHARME-SPIREE fut le choix de la stratégie d'intégration en temps de ces termes sources d'atomisation. Tels que présentés dans le système Eq.(10.1), il est envisageable d'implémenter ces sources en les intégrant simultanément avec les termes de transport, d'échanges entre sections et avec le gaz. Sur la base des arguments présentés en partie III, il a été choisi d'intégrer le phénomène d'atomisation primaire comme un opérateur dédié au sein de la stratégie de splitting présentée précédemment. La Fig.(10.7) illustre l'implémentation de ce nouvel opérateur au sein de la routine d'avancement en temps du code CEDRE.

La faisabilité numérique de ce développement commun, en particulier l'utilisation simultanée des opérateurs des termes sources (avec modèles d'évaporation de gouttes) et d'atomisation est proposée dans [Le Touze, 2015]. Cette étude a été décomposée en deux étapes afin de dissocier les transferts de masse par évaporation de ceux liés à l'atomisation : 1- un calcul avec atomisation du jet liquide et une production de gouttes inertes 2- un calcul avec atomisation et création de gouttes s'évaporant et finalement une combustion en phase gazeuse. Ces simulations sont proposées sur la configuration du banc Mascotte [Habiballah et al., 1996] dédiée à l'étude des instabilités hautes fréquences observées lors d'une combustion cryotechnique. La Fig.(10.8) témoigne de la répartition en taille des gouttes atomisées à la sortie de l'injection d'oxygène liquide.

**N.B**. La stratégie de splitting a également été employée et implémentée dans CEDRE dans [Doisneau, 2013] pour des études sur la coalescence de gouttes via l'introduction d'un opérateur de coalescence/fragmentation pour la méthode MF. Cet opérateur se retrouve naturellement dans la routine d'avancement en temps du code et il n'y a aucune limitation fonctionnelle pour activer l'ensemble des opérateurs des termes sources, d'atomisation et de coalescence simultanément. Un cas de validation de référence reste à définir pour évaluer qualitativement l'ensemble des couplages CHARME-SPIREE et les interactions entre gouttes. Comme proposé dans §9.3, cette étude serait intéressante afin d'évaluer l'impact de l'ordre d'intégration des opérateurs et le choix d'un splitting de Lie ou de Strang.

# Conclusion

Ce chapitre met en évidence la méthodologie globale suivie au cours de cette thèse à savoir l'identification des besoins en modélisation à des problèmes spécifiques (Partie I), le développement des

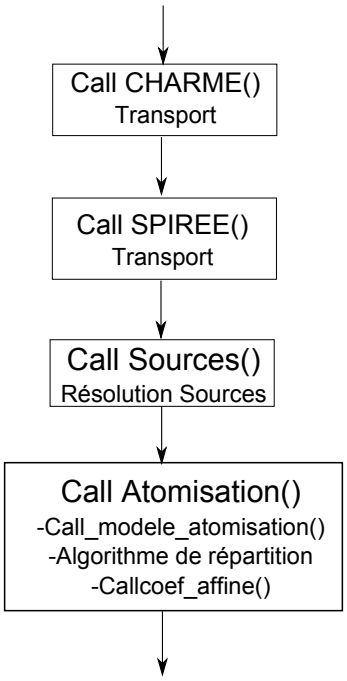


**FIGURE 10.7** – *Intégration de l'opérateur d'atomisation primaire dans la stratégie de splitting au sein du cycle d'avancement en temps du code CEDRE*

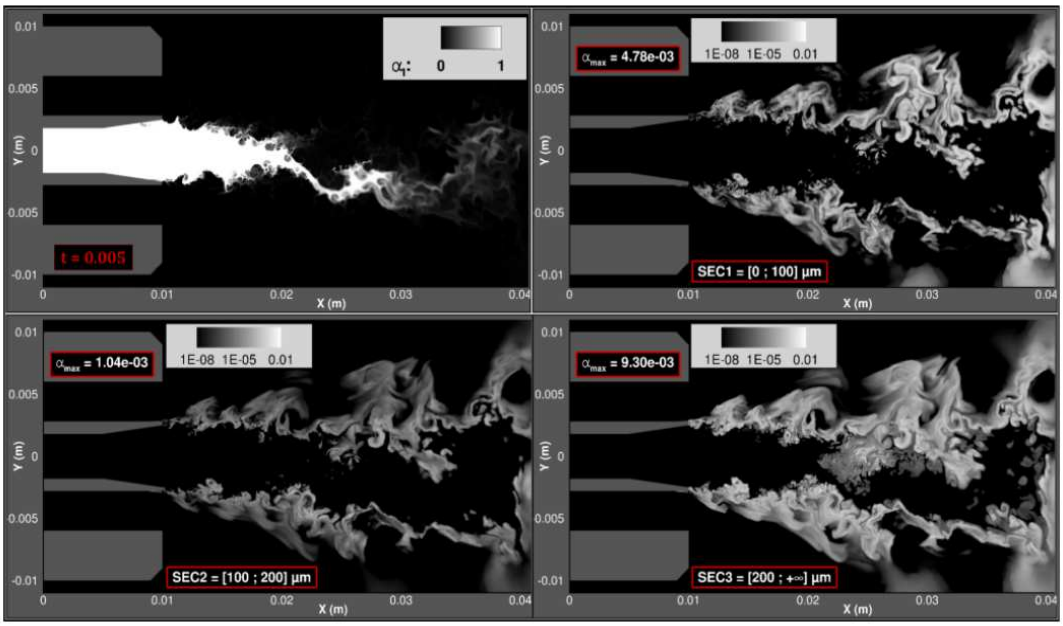


**FIGURE 10.8** – *Champs des fractions volumiques pour la phase d'oxygène liquide dans CHARME et pour les trois sections décrivant la phase dispersée atomisée. Calcul diphasique inerte de la configuration du banc Mascotte [Le Touze, 2015]*

modèles et des méthodes dédiés et attractifs d'un point de vue applicatif (Partie II et III) puis une implémentation et une première série de vérifications via un code de recherches (cf. §9.1), et finalement une mise en application dans le code CEDRE. Les simulations de propulsion solide des chapitres suivants constituent l'étape finale de cette stratégie en validant les travaux par des comparaisons avec des résultats expérimentaux et des confrontations face aux modèles utilisés habituellement. Dans les versions à venir du code CEDRE, les développements ont été définitivement intégrés ce qui démontre le réel apport des stratégies et des méthodes implémentées. Aussi, des travaux d'amélioration se poursuivent. Pour assurer une grande stabilité lors de l'intégration des termes sources, L. Matuszewski, développeur actif du code CEDRE sur les aspects thermodynamiques, travaille sur l'intégration d'un schéma implicite au sein de l'opérateur Sources comme cela est proposé dans §9.1 et [Duarte, 2011; Emre, 2014]. La nouvelle approche présentée dans §6 pour

prendre en compte la bicomposition des gouttes constitue également un enjeu capital pour les futures études de combustion en propulsion solide. Il est prévu de l'implémenter prochainement au sein du code CEDRE. Finalement, les nouveaux modèles proposés dans [Dupif, 2017] sur la polydispersion en vitesse sont une avancée majeure pour la prise en compte des croisements de particules comme expliqué dans §4.2.1. La mise en place d'une stratégie de splitting dans CEDRE est une évolution majeure en termes de codage pour la pérennisation du code et l'amélioration des résultats. Elle ouvre également la voie à de nouveaux développements portant sur l'optimisation du solveur SPIREE sur architectures parallèles (projet HPCedre). Une évaluation de l'efficacité d'une programmation hybride pour la résolution des systèmes diphasiques fortement couplés en approche Euler-Euler est en cours.

# Chapitre 11

# Etudes 1D des modèles de combustion des gouttes d'aluminium

*Dans ce chapitre, nous établissons les paramètres clés des simulations diphasiques réactives proposées dans les chapitres 12 et 13 pour différentes configurations MPS. Pour cela, nous étudions plus particulièrement la zone de combustion via des simulations réduites à des cas 1D. L'objectif est triple :*
*1- Une analyse paramétrique consacrée au choix du maillage est proposée pour différentes granulométries. Nous déterminons ainsi la discrétisation spatiale appropriée pour décrire fidèlement les évolutions des grandeurs thermodynamiques dans la zone de combustion.*
*2- Une comparaison de la dynamique des trois modèles de combustion présentés dans §2.4. Nous mettons en avant les apports du nouveau modèle de diffusion.*
*3- Une étude de l'effet de la polydispersion qui est réalisée en deux étapes. Dans un premier temps, nous considérons une granulométrie bidisperse représentative de celle rencontrée dans les MPS i.e. constituée de gouttes isolées de petites tailles et d'agglomérats beaucoup plus gros comme expliqué dans §2.1.2. Cette distribution est comparée à une approche monodisperse centrée sur les agglomérats en supposant que les gouttes isolées ont instantanément brûlées. Dans un second temps, nous analysons l'impact sur la zone de combustion d'une distribution monodisperse par rapport à plusieurs répartitions monomodales de type lognormale, plus ou moins étales.*
*Ces trois points sont discutés au sein de deux parties pour lesquelles deux granulométries sont considérées : la granulométrie supposée de la Butalane du P230 après agglomération et une distribution équivalente pour la configuration à échelle réduite LP10.*
*Du point de vue de la validation des développements numériques, la méthode eulérienne MC, présentée dans §4.1.3, est majoritairement employée car elle convient à une description discrète de la polydispersion comme expliqué dans §6.1.1. Nous utilisons aussi l'approche TSM-MF pour représenter les distributions monomodales. La stratégie d'intégration en temps est la méthode de splitting. Les simulations étant stationnaires, elles ne constituent pas des configurations adéquates pour une vérification de la technique de splitting, plus adaptée aux cas instationnaires. Notre étude valide cependant la conservation des grandeurs thermodynamiques. Finalement, dans le contexte des modèles de transferts de masse avancés, elle offre une validation supplémentaire des méthodes d'intégration des termes sources, en particulier le schéma SRST, développé dans §8.1.2.*

## 11.1 Etude des modèles de combustion avec la granulométrie P230

Cette première partie porte sur l'analyse de la granulométrie bidisperse issue de la Butalane P230. Comme expliqué dans §2.1.2 et §2.2.3.1, la distribution observée après agglomération des gouttes quittant la surface est continue et typiquement bimodale comme illustrée par la Fig.(2.20). Le développement des modèles de combustion à l'échelle d'une goutte et le besoin de réduire la complexité due à la polydispersion conduisent à utiliser des diamètres moyens. Il en résulte une approche bidisperse pour laquelle la fonction de Dirac pour les plus petites gouttes décrit les gouttes isolées et la seconde correspond aux agglomérats. La granulométrie initiale se compose donc pour les deux tiers en masse de gouttes de 30$\mu$m et pour le tiers restant d'agglomérats de 120$\mu$m. Notons que les gouttes étudiées sont bicomposants. Une fois tout l'aluminium évaporé, la phase condensée est

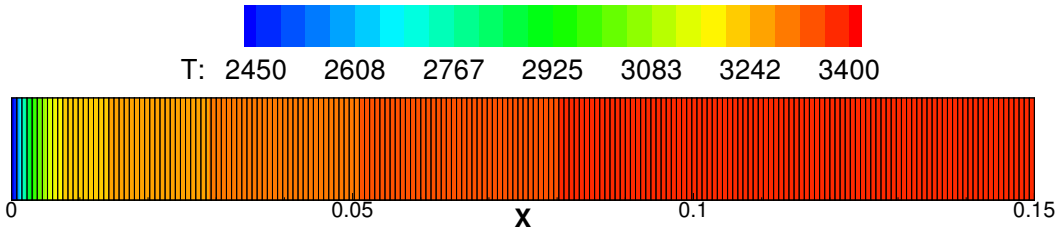


**FIGURE 11.1** – *Visualisation de la configuration 1D et du maillage A utilisé pour le calcul bidisperse de la configuration P230 et le modèle en $d^n$*

**TABLE 11.1** – *Données des maillages 1D cartésien pour la configuration P230*

| | $\Delta X$ | L |
|---|---|---|
| Maillage A | 750 $\mu$m | 0.15 m |
| Maillage B | 1500 $\mu$m | 0.15 m |
| Maillage C | 3000 $\mu$m | 0.15 m |
| Maillage D | 6000 $\mu$m | 0.15 m |

composée de résidus d'alumine dont la distribution est bimodale comme illustré par la Fig.(2.8) mais qui est à nouveau décrite de manière bidisperse. Dans le cas de la Butalane P230, il s'agit de résidus de 3$\mu$m et de résidus de 60$\mu$m. Dans l'ensemble de cette étude, nous utilisons la méthode eulérienne MC pour décrire la phase dispersée en combustion. La bicomposition est modélisée via les développements proposés dans §2.4.1.4. Nous ne considérons pas de modèle de calotte sphérique d'alumine pour corriger les transferts de masse (cf. §2.3.3) ni de rétrodiffusion d'oxydes à la surface de la goutte ; la quantité d'alumine est constante.
Dans un premier temps, nous réalisons une analyse du raffinement de maillage de la zone de combustion. Dans un second travail, nous comparons les trois modèles de combustion présentés dans §2.4 sur la base de la configuration numérique établie dans l'étude précédente. Finalement, nous évaluons l'impact de la combustion instantanée des gouttes isolées en comparant les résultats obtenus en considérant d'un côté une distribution monodisperse centrée sur les seuls agglomérats et de l'autre la granulométrie bidisperse P230.

## 11.1.1 Etude de la zone de combustion

### 11.1.1.1 Présentation de la configuration numérique

Le domaine de calcul est assimilé à un tube plan représentant une coupe radiale de la zone de combustion distribuée. Comme illustré en Fig.(11.1), la configuration 1D est constituée d'une condition d'injection à l'extrémité gauche et d'une condition de sortie à droite. Les limites supérieure et inférieure sont décrites par des conditions de glissement. La longueur du domaine a été choisie suffisamment grande pour couvrir toute l'étendue de la zone de combustion i.e. toutes les gouttes ont complètement brulé avant de sortir du domaine ; une distance de sécurité a été établie de manière à éviter toutes interactions potentielles entre la condition de sortie et la combustion des gouttes. Le maillage utilisé est cartésien, composé d'une unique rangée de cellules de même dimension.
La condition d'entrée est la même pour les phases gazeuse et dispersée à savoir une condition d'injection de type "débit imposé" ; les températures sont aussi fixées. Les propriétés thermodynamiques, données en Tab.(11.2), sont les mêmes pour les modèles en $d^n$ et ASSM mais différentes pour l'approche biespèce du modèle de diffusion. Celles-ci sont fournies en Tab.(11.3). Notons que les gouttes sont injectées en déséquilibres dynamique et thermique avec le gaz. Les températures sont déterminées de la manière suivante : la température des gouttes est fixée arbitrairement à la température de saturation et la température du gaz est déduite d'un algorithme spécifique décrit dans [Dupays, 2013]. La vitesse du gaz est calculée, via la condition à la limite du solveur CHARME, à partir du débit et d'une condition de gradient de pression nul à la surface. Par contre, les vitesses des différentes tailles de gouttes doivent être fixées comme des données d'entrée du calcul. Elles sont judicieusement choisies : 1- Inférieures à la vitesse d'injection du gaz environnant qui les entraîne. 2- Supérieures à la vitesse de régression du propergol. La vitesse d'injection des gouttes isolées est plus proche de celle du gaz que les agglomérats. En effet, les gouttes étant plus petites, elles relaxent plus rapidement vers la vitesse de la phase porteuse. Les vitesses d'injection

**TABLE 11.2** – *Paramètres de calcul pour les modèles en $d^n$ et ASSM : Cas Bidisperse P230*

| Granulométrie | $d_1$ | $d_{1,res}$ | $d_2$ | $d_{2,res}$ |
|---|---|---|---|---|
| | 30 $\mu$m | 3$\mu$m | 120$\mu$m | 60$\mu$m |
| Injection Gouttes | $T_p^{(1)}$ | $Deb^{(1)}$ (kg/m$^2$/s) | $T_p^{(2)}$ | $Deb^{(2)}$ (kg/m$^2$/s) |
| | 3230 K | N.C. | 3230 K | N.C. |
| Injection Gaz | $T_g$ | | $Deb$ (kg/m$^2$/s) | |
| | 1796 K | | N.C. | |

des gouttes sont les mêmes pour l'ensemble des simulations de cette partie afin qu'elles ne soient pas considérées comme un facteur influent de l'épaisseur de combustion comme cela est expliqué dans §2.2.3.2.
La condition de sortie est une condition à la limite de type "pression imposée" ; elle conditionne donc la pression dans le domaine. Cette pression est constante mais représentative de la pression chambre moyenne d'un MPS.
Cette configuration ne décrit cependant pas totalement la physique d'une zone de combustion distribuée en conditions de tir car deux phénomènes ont été négligés :

– Proche de la surface, l'écoulement du gaz et les trajectoires des gouttes peuvent être modélisés via une injection pariétale. Sur une distance plus importante, cela n'est pas correct car l'écoulement amont au sein de la chambre modifie les vitesses des deux phases, l'écoulement devient axial. Ce comportement n'est pas restitué par les calculs 1D.

– Les conditions d'entrée et de sortie sont fixées, le cas d'étude est donc stationnaire alors que l'écoulement au sein d'un MPS ne l'est pas. Les fluctuations de pression ont éventuellement un impact sur la zone de combustion distribuée, par exemple son étendue, soit en changeant la vitesse de régression du propergol (cf. § 1.1.2.2) soit en modifiant les propriétés locales de la phase gazeuse.

Néanmoins, notre étude constitue une approche fidèle de la zone de combustion tant du point de vue de la validation de la thermodynamique entre un état initial et final que de l'analyse du comportement global des modèles de combustion. Numériquement, cette configuration garantit des études de convergence en maillage peu coûteuses. Elle établit aussi une première analyse des contraintes numériques qu'il est possible de rencontrer pour des futures simulations de configurations moteurs.

Le couplage entre phases est réalisé avec la méthode de splitting de Lie présentée dans §7.1.4.1. Une intégration temporelle explicite RK2 et une résolution d'ordre 2 en espace du transport de la phase gazeuse sont utilisées. La convection de la phase liquide est aussi intégrée explicitement avec un schéma RK2 et une méthode d'ordre 2 en espace. L'intégration des termes sources est faite avec un schéma explicite RK2-TVD.

#### 11.1.1.2 Raffinement en maillage avec le modèle en $d^n$

Nous étudions ici l'effet du maillage sur la dynamique de la zone de combustion c'est-à-dire une possible modification de son épaisseur, de l'évolution des diamètres des gouttes et du profil thermique. On vérifie également que les tailles des résidus et la température de fin de combustion sont correctes. Quatre maillages sont utilisés, leurs caractéristiques sont données en Tab.(11.1). Les paramètres numériques des simulations sont fixés par le maillage le plus raffiné. Ainsi, nous souhaitons résoudre explicitement la phase gazeuse ce qui nous conduit à avoir une condition $\mathrm{CFL}_g$ inférieure à $0,3$ dans l'ensemble du domaine. Dans ce cas précis, le pas de temps de splitting est fixé à $5.10^{-7}$s. Du point de vue de la résolution des échelles de temps du problème, ce pas de temps est suffisamment petit car il est inférieur à tous les temps caractéristiques tels que les temps de relaxation des résidus. Le couplage entre les deux phases est fidèlement décrit. Une étude préliminaire avec des pas de temps inférieurs a confirmé que la solution ainsi obtenue était convergée. La granulométrie considérée pour cette étude est la distribution bidisperse de la Butalane du P230. Elle est rappelée en Tab.(11.2) ainsi que les paramètres de calcul pour le modèle de combustion en $d^n$. Nous choisissons ce modèle basé sur des temps de combustion expérimentaux (cf. §2.4.1.3) car il a été éprouvé au cours de différentes campagnes de validation et semble fournir des épaisseurs de combustion représentatives.

**N.B**. Avant d'analyser les résultats numériques, il nous faut préciser que les éléments discriminant les différentes courbes, à savoir les symboles ∘ ou encore ×, ne correspondent absolument pas aux valeurs des cellules des maillages étudiés. Les courbes sont obtenues via des interpolations linéaires mais restent représentatives des évolutions spatiales des différentes grandeurs.

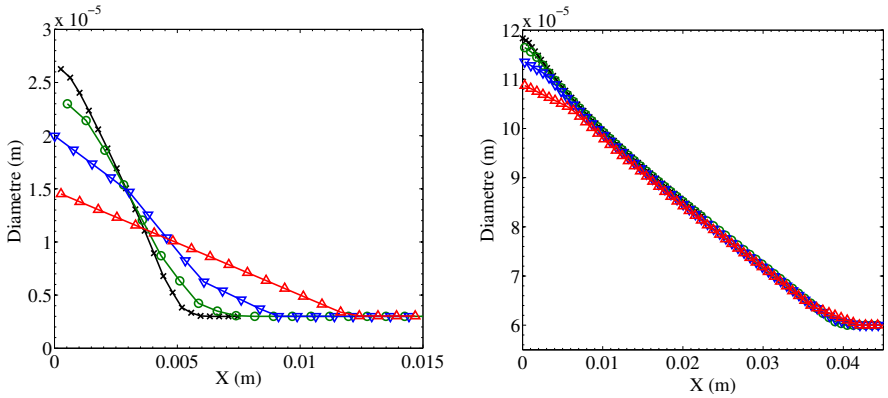


**FIGURE 11.2** – *Evolution spatiale du diamètre des gouttes isolées (à gauche) et des agglomérats (à droite) pour le modèle de combustion $d^n$ et la configuration P230. Résultats pour les maillages A : − × −, B : − ∘ −, C : −▽− et D : −△−*

Dans un premier temps, nous vérifions que la température de fin de combustion attendue, qui est de 3396K, est atteinte quel que soit le maillage employé. De plus, il n'y a pas d'erreurs sur le diamètre des résidus. Une discrétisation spatiale grossière ne doit pas impacter les valeurs de l'état final. En effet, la formulation Volumes Finis ainsi que la stratégie de splitting doivent garantir la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie.
Dans un second temps, notre analyse montre que la dynamique de la combustion est significativement différente. En effet, comme illustré par la Fig.(11.2), l'épaisseur de la zone de combustion des gouttes isolées passe du simple au double entre le maillage D et A. Le maillage D conduit donc à une description trop imprécise de la combustion des petites gouttes avec moins de deux cellules dans la zone de combustion. En effet, leur diamètre passe de 30$\mu$m à moins de 15$\mu$m sur une seule cellule ce qui correspond à une quantité importante d'aluminium évaporé. Les conséquences sur le profil thermique, donné en Fig.(11.3) est notable puisque la température relevée dans la première cellule est environ 2700K alors que la température d'injection est 1796K. L'utilisation des maillages plus fins corrige ce saut de température au niveau de l'injection ; le maillage A garantit d'avoir au moins 6 cellules dans la zone de combustion. Pour les agglomérats, les erreurs sur l'étendue de la zone de combustion sont beaucoup plus faibles car les échanges se répartissent sur une distance suffisamment importante. Il y a donc un plus grand nombre de points de discrétisation dans la zone de combustion par rapport au cas des gouttes isolées. Des erreurs subsistent principalement en début de combustion. Elles sont corrigées avec les maillages A et B.

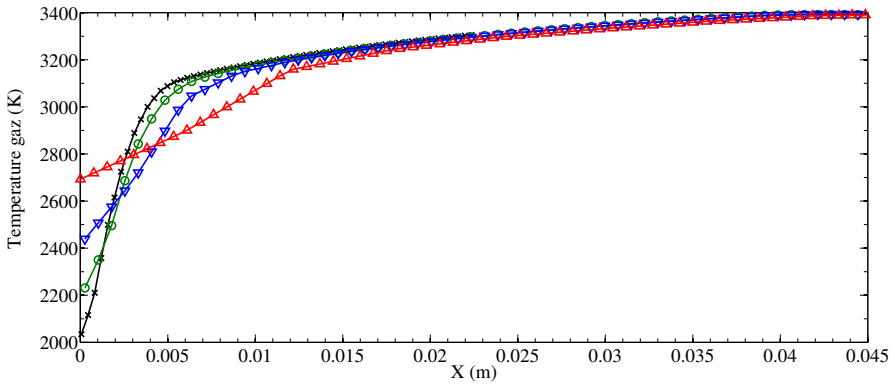


**FIGURE 11.3** – *Evolution spatiale de la température du gaz pour le modèle en $d^n$ et la configuration P230. Résultats pour les maillages A : − × −, B : − ∘ −, C : −▽− et D : −△−*

Finalement, cette étude montre qu'un maillage trop grossier, c'est-à-dire avec peu de cellules dans

la zone de combustion, a deux conséquences :
– Un épaississement de la zone de combustion.
– Un profil thermique et des évolutions de diamètres de gouttes mal décrits.
Dans l'optique d'un calcul moteur, les effets peuvent être considérables puisque les échanges de masse, de quantité de mouvement et d'énergie n'ont pas lieu dans la même région de la chambre. Pour les configurations moteur présentant du VSP, il est possible que l'écoulement soit significativement impacté à la surface du propergol entraînant un développement différent des structures tourbillonnaires (cf. §2.2.1.3). Dans le cadre d'étude de l'ITHAC, présenté dans §2.2.2, la grande sensibilité du phénomène implique que le couplage entre l'acoustique et la phase dispersée ainsi que les évolutions des différentes grandeurs doivent être représentatifs, ce qui n'est pas assuré avec un maillage grossier.
En conclusion, aucun problème numérique n'a été relevé pour le pas de temps utilisé. L'effet d'une discrétisation spatiale grossière impacte les plus petites gouttes qui brûlent alors sur une plus longue distance ; l'interaction avec la phase gazeuse est également altérée dans la mesure où, dans notre étude, les gouttes isolées représentent 12% du débit total injecté. Pour de futures simulations MPS, nous préconisons donc un minimum de 5 cellules pour décrire la zone de combustion ; dans tous les cas la faisabilité du calcul n'est pas remise en cause. Il est cependant conseillé de réaliser une étude préliminaire 1D avant d'entreprendre un calcul moteur.

### 11.1.2 Dynamiques de combustion en fonction du modèle

Nous proposons ici de comparer les trois modèles de combustion afin de souligner leurs caractéristiques principales. Nous reprenons alors la configuration précédente ainsi que les mêmes paramètres numériques car nous continuons notre évaluation de la granulométrie bidisperse. Nous choisissons le maillage A qui offre une description suffisamment précise de la zone de combustion. Les données d'entrée du modèle ASSM sont les mêmes que ceux de l'approche en $d^n$. Pour le modèle biespèce, les paramètres sont fournis en Tab.(11.3).

**TABLE 11.3** – *Paramètres de calcul pour le modèle de diffusion : cas Bidisperse P230*

| Granulométrie | $d_1$ | $d_{1,res}$ | $d_2$ | $d_{2,res}$ |
|---|---|---|---|---|
| | 30 $\mu$m | 3$\mu$m | 120$\mu$m | 60$\mu$m |
| Injection Gouttes | $T_p^{(1)}$ | $Deb^{(1)}$ (kg/m$^2$/s) | $T_p^{(2)}$ | $Deb^{(2)}$ (kg/m$^2$/s) |
| | 3230 K | N.C. | 3230 K | N.C. |
| Injection Gaz | $T_g$ | | $Deb$ (kg/m$^2$/s) | |
| | 2245 K | | N.C. | |

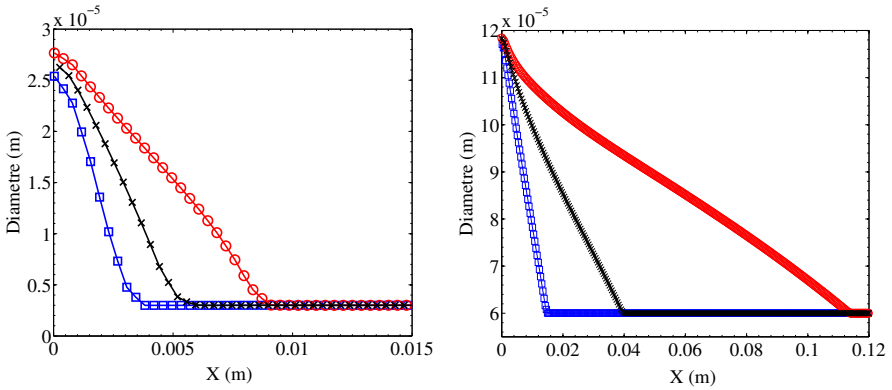


**FIGURE 11.4** – *Evolution spatiale du diamètre des gouttes isolées (à gauche) et des agglomérats (à droite) pour la configuration P230. Résultats pour le modèle ASSM : –□–, en $d^n$ : – × – et de diffusion : – ○ –*

Nous vérifions tout d'abord que la température de fin de combustion et les tailles des résidus sont correctement atteintes pour les trois modèles. Pour le modèle de diffusion, nous validons aussi que tout l'oxydant OX est consommé à la fin de la combustion. Notons que la fraction massique de l'espèce OX injectée est égale à 1.
Les évolutions spatiales des tailles, données en Fig.(11.4), montrent des comportements très différents entre les trois approches : le modèle ASSM présente une combustion très rapide par rapport au modèle en $d^n$ avec une zone de combustion 40% plus courte pour les gouttes isolées et presque

3 fois moins étendue pour les agglomérats. Le modèle de diffusion est significativement l'approche la plus "lente" puisque l'épaisseur de la zone de combustion des gouttes isolées a plus que doublé par rapport à l'approche ASSM et celle des agglomérats a été multipliée environ par 11. Notons que la zone de combustion serait encore plus étendue si le modèle de calotte avait été activé.
Les différences entre les modèles sont également considérables du point de vue de l'évolution de la température du gaz, comme illustré en Fig.(11.5). Notons que la zone de combustion des gouttes isolées se distingue clairement de celle des agglomérats. En effet, on constate un gradient thermique très marqué sur une première zone proche de l'injection puis une élévation de température moins franche sur une seconde région qui est délimitée par la fin de combustion des agglomérats. Les épaisseurs de ces deux régions correspondent parfaitement aux épaisseurs de la zone de combustion des deux tailles de gouttes représentées dans la Fig.(11.4).
Dans la mesure où le modèle en $d^n$ est paramétré sur des temps de combustion expérimentaux, nous le prenons comme base de comparaison dans le cadre spécifique de cette étude. Ce modèle n'est pas la référence car il a été établi en supposant que l'environnement gazeux autour de la goutte, en particulier la concentration en oxydants, ne varie pas au cours de la combustion. Ce point constitue une limitation forte puisque le temps de combustion est très dépendant des fractions molaires des différents oxydants comme expliqué dans §2.3. Le modèle ASSM a une dynamique rapide alors que l'approche biespèce est particulièrement lente.
Une étude complémentaire a montré que l'évolution de surface en fonction du temps est linéaire pour les trois modèles ; leur différence repose donc sur le coefficient de la loi de régression de la taille.

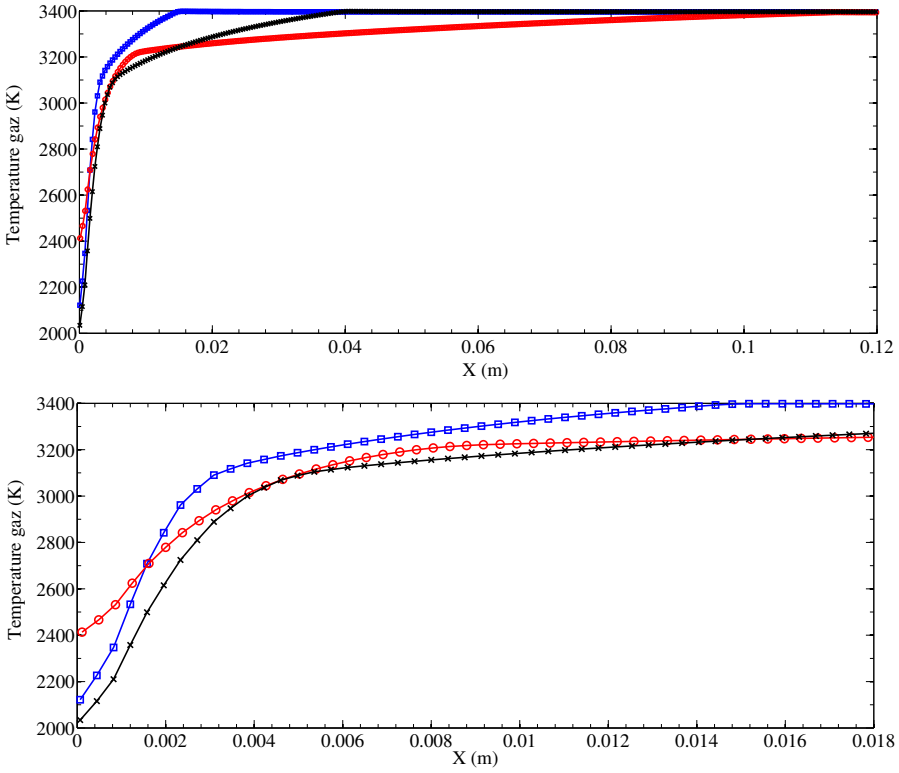


**FIGURE 11.5** – *Evolution spatiale de la température du gaz sur le domaine (en haut) et zoom au niveau de l'injection (en bas) pour la configuration P230. Résultats pour le modèle ASSM : –□–, en $d^n$ : – × – et de diffusion : – ○ –*

Les différents comportements observés s'expliquent par les mécanismes qui régissent les transferts de masse :
– L'approche monoespèce de la phase gazeuse ne permettant pas un suivi explicite des oxydants et des produits de combustion (cf. §2.4.1.3), le modèle en $d^n$ est donc piloté par les paramètres d'entrée.
– Pour le modèle ASSM, le débit évaporé, exprimé par l'Eq.(2.16), dépend de façon logarithmique de la différence entre la température du gaz et celle des gouttes supposée constante. Cet écart est minimal en début de combustion. Le modèle ASSM est donc relativement lent au niveau de l'injection des gouttes. Cependant, la dynamique des transferts de masse est accélérée avec l'élévation de température de la phase porteuse.

– Pour le modèle de diffusion, le débit évaporé est piloté par la diffusion des espèces globales OX et PC. Ainsi, en début de combustion la fraction massique de l'espèce oxydante est maximale, la combustion des gouttes est rapide. Au fur et à mesure que l'espèce OX est consommée, le débit évaporé devient moins important. Il est minimal en fin de combustion ce qui explique donc que la zone de combustion des agglomérats soit significativement étendue par rapport aux autres modèles.

Le modèle de diffusion transcrit plus facilement la dynamique des échanges de masse. En effet, la température du gaz environnant n'est pas un facteur influent de l'évaporation comme expliqué dans §2.3.1. Le modèle ASSM n'est pas adapté alors que l'approche biespèce présente un comportement représentatif de l'appauvrissement en oxydants.

Pour le modèle de diffusion, un axe d'amélioration consisterait à consolider les données thermodynamiques des espèces globales OX et PC telles que la conductivité thermique moyenne du milieu gazeux dont dépend proportionnellement le débit évaporé. Une étude expérimentale des propriétés thermophysiques des espèces gazeuses en conditions de tir est donc requise. Il est d'ailleurs important de disposer de données expérimentales fiables et représentatives aussi bien pour consolider le modèle en $d^n$ que pour calibrer le modèle de diffusion.

### 11.1.3 Comparaison entre granulométries monodisperse et bidisperse avec le modèle de diffusion

Cette troisième étude a pour objectif de comparer la combustion distribuée d'une phase condensée bidisperse et monodisperse. La première est la distribution utilisée dans les études précédentes. La seconde correspond au cas où la combustion des gouttes isolées est instantanée. Seuls les résidus sont injectés dans le domaine. Dans ce cas précis, la température du gaz imposée à la limite prend en compte l'apport d'énergie dû à la combustion des gouttes isolées. De plus, la fraction massique de l'espèce OX n'est plus égale à 1 puisqu'une partie a déjà été consommée. Dans cette étude, nous analysons si la simulation des gouttes isolées est essentielle dans la mesure où la zone de combustion est peu étendue.

A nouveau, nous reprenons la configuration précédente ainsi que les mêmes paramètres numériques. Pour la distribution monodisperse, les données d'entrée sont précisées en Tab.(11.4).

**TABLE 11.4** – *Paramètres de calcul pour le modèle de diffusion : cas monodisperse P230 avec combustion instantanée des gouttes isolées*

| Granulométrie | $d_1$ | $d_{1,res}$ | $d_2$ | $d_{2,res}$ |
|---|---|---|---|---|
| | X | $3\mu$m | $120\mu$m | $60\mu$m |
| Injection Gouttes | $T_p^{(1)}$ | $Deb^{(1)}$ (kg/m$^2$/s) | $T_p^{(2)}$ | $Deb^{(2)}$ (kg/m$^2$/s) |
| | 3230 K | N.C. | 3230 K | N.C. |
| Injection Gaz | $T_g$ | | $Deb$ (kg/m$^2$/s) | |
| | 3175 K | | N.C. | |

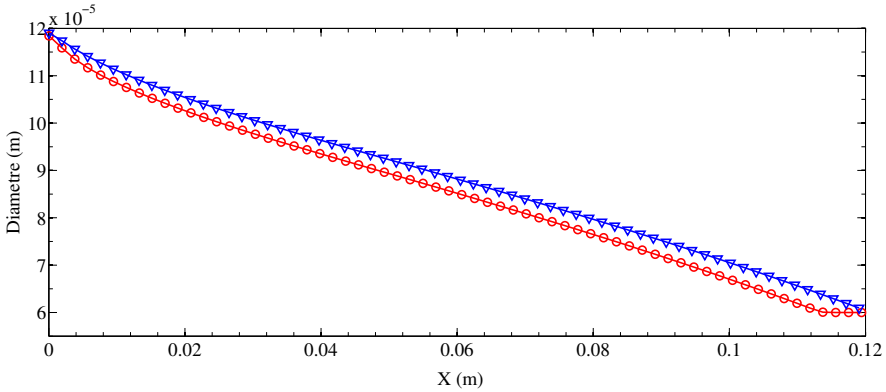


**FIGURE 11.6** – *Evolution spatiale du diamètre des agglomérats pour la configuration P230. Résultats pour la distribution bidisperse :* $-\circ-$ *et la distribution monodisperse :* $-\nabla-$

Dans un premier temps, nous validons l'approche monodisperse en nous assurant que la température de combustion est bien égale à 3396K et toute l'espèce OX a été consommée. La taille des résidus issus de la combustion des agglomérats est également correcte. Puis, nous analysons

les conséquences de la non prise en compte de la combustion des gouttes isolées. Comme illustré en Fig.(11.6), l'évolution de la taille des agglomérats ne présente pas de changement significatif si les gouttes isolées ont déjà brûlées. L'épaisseur de combustion des agglomérats est équivalente pour les deux simulations. On note toutefois une dynamique légèrement plus rapide pour la simulation bidisperse. Cela est dû à une fraction massique d'oxydant plus importante à l'injection qui tend à augmenter le débit évaporé en début de combustion ; cet effet s'atténue rapidement. les régressions du diamètre, linéaires selon la coordonnée spatiale, présentent des coefficients directeurs similaires. La dynamique de combustion n'est pas particulièrement impactée par celle des gouttes isolées. Cette conclusion doit être nuancée dans la mesure où les deux tailles initiales sont suffisamment différentes. Pour des tailles plus proches avec des temps de combustion similaires, il serait intéressant de réitérer cette étude.

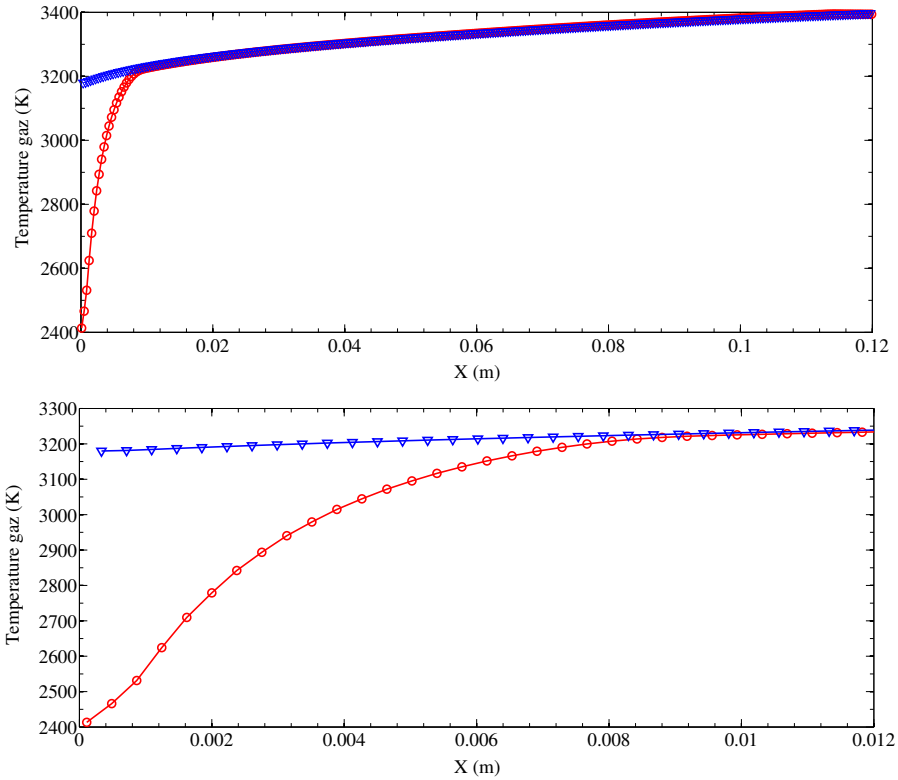


**FIGURE 11.7** – *Evolution spatiale de la température du gaz sur le domaine (en haut) et zoom au niveau de l'injection (en bas) pour la configuration P230. Résultats pour la distribution bidisperse :* $-\circ-$ *et la distribution monodisperse :* $-\nabla-$

Finalement, la différence majeure entre les deux distributions est observable via les évolutions spatiales de la température du gaz données en Fig.(11.7). Elle résulte de l'écart entre les deux températures du gaz à l'injection pour les cas monodisperse et bidisperse. Cependant, à l'exception de la zone correspondant à la combustion des gouttes isolées, le profil thermique est équivalent. Cette observation rejoint la conclusion précédente selon laquelle la combustion des agglomérats est décorrélée de celle des gouttes isolées. En conséquence, ne pas simuler la combustion distribuée des gouttes isolées conduit à modifier sensiblement le profil de température en proche surface. Il reste à analyser l'impact potentiel d'une telle approximation sur des configurations de moteur instable. Une telle analyse est conduite dans les chapitres 12 et 13 sur des configurations présentant une instabilité de type VSP potentiellement couplée à du VSO.

## 11.2 Etude de la combustion totale de gouttes monocomposants : utilisation de la granulométrie LP10 et du modèle ASSM

Cette seconde partie porte sur l'analyse de la granulométrie P230 qui a été mise à l'échelle dans le cadre de simulations pour la configuration moteur LP10. Nous rappelons que cette dernière est une maquette simplifiée à l'échelle 1/35ème du P230. La taille initiale des gouttes doit être réévaluée car les principales interactions entre le gaz et la phase dispersée doivent être conservées. Pour nos simulations, nous utilisons les résultats d'une étude dimensionnelle des équations diphasiques réactives [Radenac, 2010a] dont le principe et l'analyse reposent sur le découpage du moteur en deux zones : la zone de combustion et celle où les résidus évoluent. Le choix d'échelles est aussi réduit à une seule donnée spatiale, ici le rayon du moteur $R$. Une étude complémentaire [Radenac, 2010b] a confirmé qu'une mise à l'échelle d'une granulométrie conservant le rapport $d^2/R = cst$ offre le moins de dépendance des paramètres de similitudes pour les interactions diphasiques. Dans ce cas précis, l'épaisseur de la zone de combustion des gouttes est similaire rapportée aux deux échelles. Il n'a cependant pas été montré que la mise à l'échelle des tailles des résidus avec ce rapport était pertinent.

**TABLE 11.5** – *Données des maillages 1D cartésien pour la configuration LP10*

| | $\Delta X$ | L |
|---|---|---|
| Maillage A | 20 $\mu$m | 0.005 m |
| Maillage B | 50 $\mu$m | 0.005 m |
| Maillage C | 100 $\mu$m | 0.005 m |
| Maillage D | 200 $\mu$m | 0.005 m |

Ce principe de similitude conduit à retenir des gouttes isolées de 5$\mu$m et des agglomérats de 20$\mu$m. Pour le LP10, n'étant pas certain du calcul des tailles de résidus, nous considérons une combustion complète des gouttes d'aluminium c'est-à-dire sans présence d'alumine en début de combustion et sans production de résidus. Les gouttes étudiées sont donc monocomposants ce qui offre la possibilité de valider la méthode MF avec plus d'aisance. En effet, comme expliqué dans §6.1.1, les difficultés de l'approche sectionnelle en taille concerne le suivi de l'évolution des tailles et l'obtention du diamètre exact du résidu final. Dans le cas où il n'y pas de résidus, la combustion des gouttes d'aluminium est équivalente à celle de gouttes d'hydrocarbures. Il est alors envisageable de considérer des distributions initiales continues. Aussi, dans la troisième partie de cette étude, nous proposons une comparaison entre une distribution monodisperse représentant les agglomérats et plusieurs distributions monomodales. Nous employons alors la méthode MC dans le premier cas et la méthode TSM-MF pour les distributions continues. Cela nous permet dans le même temps de valider le schéma SRST dans le cadre de gouttes en combustion. Pour l'ensemble de cette étude, nous utilisons le modèle ASSM.
Comme cela a été proposé pour l'étude de la granulométrie P230, nous réalisons, dans un premier temps, une analyse du raffinement de maillage de la zone de combustion. Dans un second temps, nous évaluons l'impact de la combustion instantanée des gouttes isolées en comparant une distribution monodisperse à la granulométrie bidisperse LP10. Puis, comme mentionné plus haut, nous étudions l'effet de la polydispersion dans une troisième partie.

### 11.2.1 Etude du raffinement de maillage

La configuration d'étude de la granulométrie LP10 reprend en grande partie les caractéristiques présentées dans la partie précédente en §11.1.1.1. La taille du domaine de calcul a toutefois été réduite car les temps de combustion des gouttes sont plus courts.
Nous étudions l'effet du maillage sur la dynamique de la zone de combustion avec le modèle ASSM qui induit le plus de contraintes sur la taille des mailles pariétales ; les conditions de calcul sont fournies en Tab.(11.6). Il est intéressant de souligner les difficultés numériques rencontrées en utilisant des tailles de gouttes bien plus petites que celles de la granulométrie P230. Nous nous assurons également que la combustion complète des gouttes d'aluminium ne pose pas de problèmes particuliers.
Pour cette étude paramétrique, quatre maillages sont utilisés ; leurs caractéristiques sont données en Tab.(11.5). A nouveau, nous souhaitons résoudre explicitement la phase gazeuse ce qui nous conduit à retenir un pas de temps de splitting de $1.10^{-8}$s. Du point de vue de la résolution des

**TABLE 11.6** – *Paramètres de calcul pour le modèle ASSM : cas Bidisperse LP10 sans résidus (combustion complète des gouttes)*

| Granulométrie | $d_1$ | $d_{1,res}$ | $d_2$ | $d_{2,res}$ |
|---|---|---|---|---|
| | 5 $\mu$m | 0$\mu$m | 20$\mu$m | 0$\mu$m |
| Injection Gouttes | $T_p^{(1)}$ | $Deb^{(1)}$ (kg/m$^2$/s) | $T_p^{(2)}$ | $Deb^{(2)}$ (kg/m$^2$/s) |
| | 3230 K | N.C. | 3230 K | N.C. |
| Injection Gaz | $T_g$ | | $Deb$ (kg/m$^2$/s) | |
| | 1725 K | | N.C. | |

échelles de temps du problème, ce pas de temps est suffisamment petit car il est inférieur aux temps de relaxation de gouttes de taille micrométrique. Le couplage entre les deux phases est fidèlement décrit. Une étude préliminaire avec des pas de temps inférieurs a confirmé que la solution était convergée.

**N.B**. Nous rappelons à nouveau que les éléments discriminant les différentes courbes, à savoir les symboles $\circ$ ou encore $\times$, ne correspondent absolument pas aux valeurs des cellules des maillages étudiés. Les courbes sont obtenues via des interpolations linéaires mais restent représentatives des évolutions spatiales des différentes grandeurs.

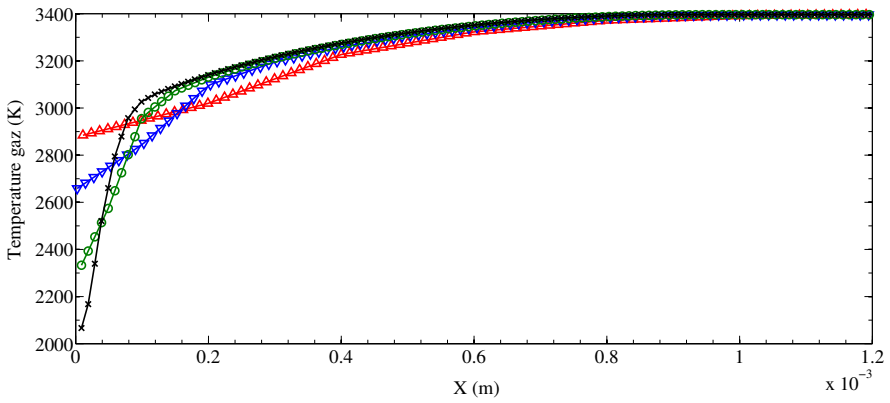


**FIGURE 11.8** – *Evolution spatiale de la température du gaz pour le modèle de combustion ASSM. Résultats pour les maillages A :* $-\times-$*, B :* $-\circ-$*, C :* $-\nabla-$ *et D :* $-\Delta-$

Dans un premier temps, nous vérifions que la température de fin de combustion attendue est correctement obtenue quel que soit le maillage employé.
Dans un second temps, nous obervons une dynamique de combustion significativement différente selon le maillage. En effet, comme illustré par la Fig.(11.9), l'épaisseur de combustion des gouttes isolées est multipliée par 5 entre le maillage le plus fin et le plus grossier. Le maillage D conduit à une description trop imprécise avec seulement trois cellules dans la zone de combustion. En effet, le diamètre des gouttes isolées passe de 5$\mu$m à moins de 1$\mu$m sur une seule cellule ce qui correspond à une quantité importante d'aluminium évaporé. Les conséquences sur le profil thermique, donné en Fig.(11.8), est notable puisque la température dans la première cellule est environ 2900K alors que la température d'injection est 1725K. L'utilisation des maillages plus fins corrige ce saut de température au niveau de l'injection ; le maillage A garantit de compter au moins 7 cellules dans la zone de combustion. Pour les agglomérats, les erreurs sur l'épaisseur de combustion sont beaucoup plus faibles car les échanges s'effectuent sur une zone plus étendue. Des erreurs subsistent toutefois proche de la surface et en fin de combustion. Elles sont corrigées avec les maillages A et B.
Finalement, cette étude confirme qu'un maillage grossier épaissit la zone de combustion, en particulier pour les plus petites gouttes. Le profil thermique dans la région correspondant à la combustion des gouttes isolées n'est pas correctement décrit. Les conséquences pour des calculs d'instabilités moteurs peuvent être importantes. Si aucun problème numérique n'a été relevé, le pas de temps utilisé pour les maillages les plus fins, à savoir $1.10^{-8}$s, est trop faible pour être envisagé sur des simulations moteurs. Nous souhaitons au minimum un à deux ordres de grandeurs de plus pour des calculs industriels. Notons que l'utilisation de maillages très raffinés au niveau de la surface de combustion introduit d'autres problèmes de modélisation tels que la prise en compte de la non régu-

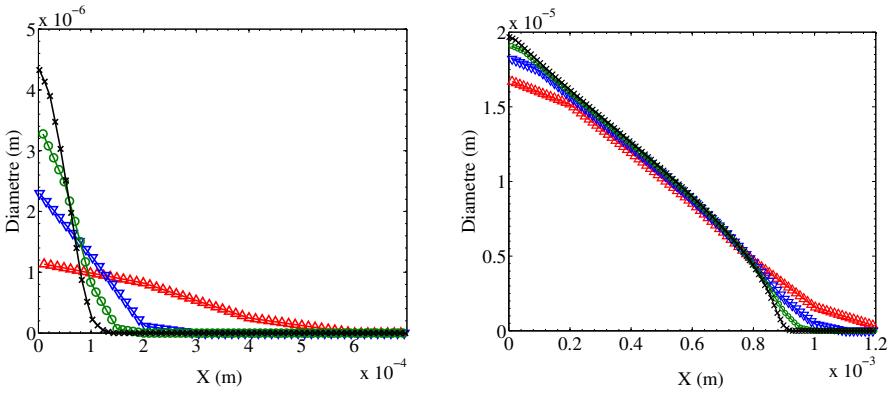


**FIGURE 11.9** – *Evolution spatiale du diamètre des gouttes isolées (à gauche) et des agglomérats (à droite) pour le modèle de combustion ASSM. Résultats pour les maillages A : − × −, B : − ○ −, C : −▽− et D : −△−*

larité de la surface du propergol ou encore les limites d'un modèle d'écoulements à phase dispersée modérément denses comme expliqué dans §3.2. Avec le maillage C, il est possible de résoudre de manière explicite l'acoustique avec un pas de temps de $2.10^{-7}$s et d'avoir un suivi correct de la régression des agglomérats. Cependant, les évolutions des gouttes isolées et de la température du gaz sont encore mal restituées. Le choix du maillage pour l'étude des petites gouttes, brûlant en moins d'un millimètre, pose un réel problème. Pour la granulométrie LP10, nous évaluons dans la partie suivante si la combustion instantanée des gouttes isolées est une solution possible et n'influence pas la dynamique des transferts de masse pour les agglomérats.

### 11.2.2 Comparaison entre granulométries monodisperse et bidisperse

Nous comparons ici la combustion distribuée d'une phase condensée bidisperse à celle d'une phase condensée monodisperse. Cette dernière correspond au cas où la combustion des gouttes isolées est instantanée et il n'y a pas de résidus. Dans ce cas précis, la température du gaz imposée à la limite prend en compte l'apport d'énergie dû à la combustion des gouttes isolées. Dans cette étude, nous analysons si la simulation des gouttes isolées est essentielle dans la mesure où l'épaisseur de la zone de combustion est très peu étendue par rapport à celle des agglomérats.

**TABLE 11.7** – *Paramètres de calculs pour le modèle ASSM : cas Monodisperse LP10 sans résidus (combustion complète des gouttes)*

| Granulométrie | $d_1$ | $d_{1,res}$ | $d_2$ | $d_{2,res}$ |
|---|---|---|---|---|
| | X | X | $20\mu$m | $0\mu$m |
| Injection Gouttes | $T_p^{(1)}$ | $Deb^{(1)}$ (kg/m$^2$/s) | $T_p^{(2)}$ | $Deb^{(2)}$ (kg/m$^2$/s) |
| | X | X | 3230 K | N.C. |
| Injection Gaz | $T_g$ | | $Deb$ (kg/m$^2$/s) | |
| | 2910 K | | N.C. | |

Nous reprenons ici la même configuration et nous conservons le maillage C. Ce maillage nous permet d'utiliser un pas de temps égal à $2.10^{-7}$s compatible avec une intégration explicite de la phase gazeuse. Nous comparons les deux granulométries avec le modèle ASSM. Pour la distribution monodisperse, les données d'entrée sont précisées en Tab.(11.7).
Nous validons tout d'abord l'approche monodisperse en nous assurant que la température de fin de combustion est correcte. Comme illustré en Fig.(11.10), l'évolution de la taille des agglomérats ne subit aucun changement si l'on considère que les gouttes isolées ont déjà brûlées. De plus, l'épaisseur de la zone de combustion des agglomérats est la même pour les deux simulations. La dynamique de combustion n'est pas impactée par celle des gouttes isolées.
Comme cela est le cas pour la combustion avec la granulométrie P230, la différence majeure entre les deux distributions est observable en comparant les évolutions spatiales de la température du gaz données en Fig.(11.11). L'écart entre la température du gaz à l'injection des cas monodisperse et bidisperse explique cette différence. A l'exception de la zone correspondant à la combustion des gouttes isolées, le profil thermique est équivalent.
La combustion des agglomérats apparaît donc décorrélée de celle des gouttes isolées. Notons que

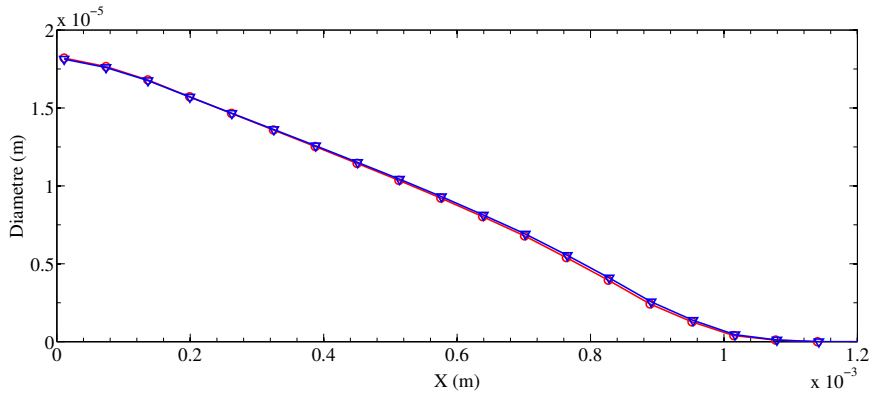


**FIGURE 11.10** – *Evolution spatiale du diamètre des agglomérats pour la configuration LP10. Résultats pour la distribution bidisperse : – ○ – et la distribution monodisperse : –▽–*

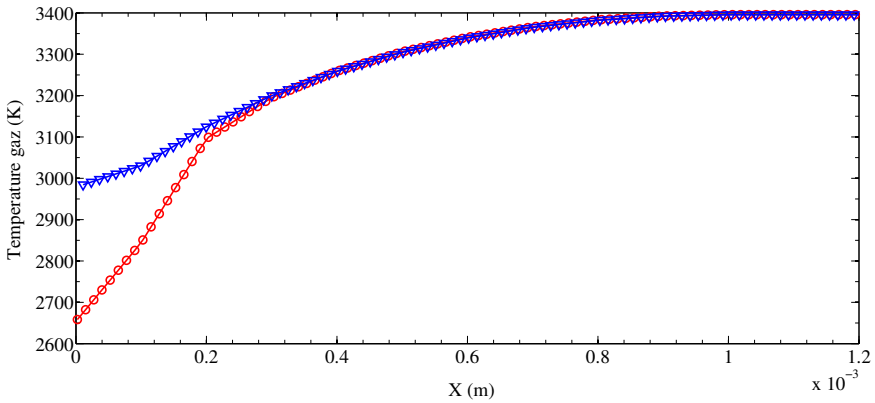


**FIGURE 11.11** – *Evolution spatiale de la température du gaz au niveau de l'injection pour la configuration P230. Résultats pour la distribution bidisperse : – ○ – et la distribution monodisperse : –▽–*

cette conclusion est obtenue pour le modèle ASSM mais elle confirme aussi le comportement relevé avec le modèle de diffusion pour l'étude de la granulométrie P230.
La conséquence principale est de ne pas restituer le profil de température à proximité de la surface du propergol. Etant contraint par le pas de temps associé à un maillage trop raffiné, nous choisissons de poursuivre l'étude avec une approche monodisperse.

**TABLE 11.8** – *Conditions d'injection des gouttes pour l'approche monomodale avec plusieurs distributions lognormales réparties sur 3 sections*

| | Monomodale 1 | Monomodale 2 | Monomodale 3 |
|---|---|---|---|
| $\mu_{LN}$ ($\mu$m) | 19.99 | 18.7 | 16.7 |
| $\sigma_{LN}$ | 1.02 | 1.2 | 1.35 |
| $d_{30}^{(1)}$ ($\mu$m) | 19.69 | 17.17 | 15.44 |
| $d_{30}^{(2)}$ ($\mu$m) | 20.32 | 23.00 | 24.82 |
| $d_{30}^{(3)}$ ($\mu$m) | 0.0 | 41.72 | 43.96 |

### 11.2.3 Impact de la polydispersion : Monodale vs Monodisperse

Dans cette troisième partie, nous évaluons l'effet de la polydispersion continue en taille par rapport au choix d'une approche discrète via un diamètre moyen. Nous proposons trois distributions lognormales plus ou moins larges pour décrire la répartition de la masse. Pour chaque granulométrie, le maximum de concentration en masse i.e. le mode de la distribution, est fixé sur le diamètre des agglomérats de 20$\mu$m. Il s'agit d'un choix d'étude. Ce dernier est aussi valable qu'un paramétrage sur un autre diamètre moyen tel que le $d_{32}$ présenté dans §2.2.3.1. Même si une analyse sur le choix d'un diamètre moyen représentatif semble indispensable, elle est particulièrement complexe à mettre en place étant donné le nombre et la variété des phénomènes physiques simulés. De plus,

la détermination d'un diamètre moyen pour les transferts de masse n'est pas nécessairement pertinent pour décrire la dynamique globale du spray. Par exemple, dans l'étude d'acoustique diphasique linéaire proposée dans §5.2, c'est le diamètre $d_{31}$ qui ressort.
Les trois distributions lognormales sont représentées en Fig.(11.12) et leurs caractéristiques sont fournies en Tab.(11.8). Nous réalisons un paramétrage sur l'écart-type des fonctions lognormales pour estimer l'effet de l'étalement des distributions.

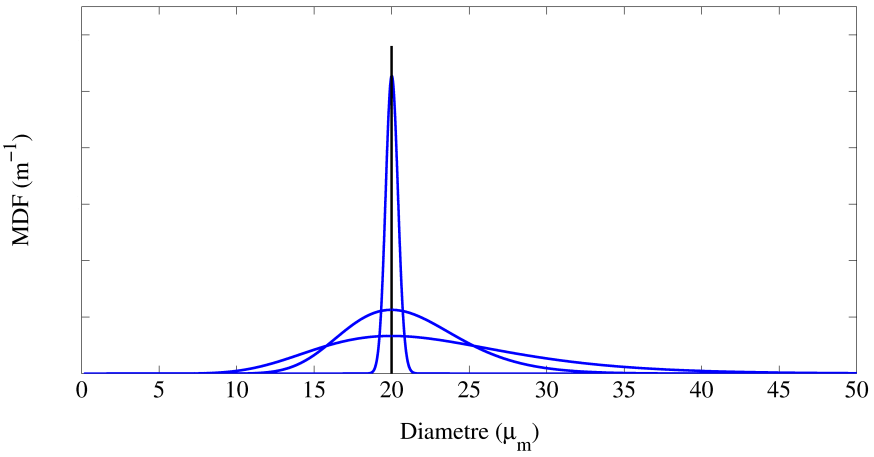


**FIGURE 11.12** – *Illustration des 3 cas monomodaux de type lognormale ayant le même mode $d = 20\mu m$*

Nous reprenons la configuration numérique de l'analyse précédente, à savoir le maillage C et un pas de temps de $2.10^{-7}$s. Le résultat pour la distribution monodisperse est déjà disponible ; il est simplement repris dans cette partie. Les simulations de la combustion des granulométries lognormales sont réalisées avec la méthode TSM-MF. Une discrétisation de l'espace des tailles est faite avec trois sections et une stratégie avec $\Delta r = cst$ qui semble être la plus appropriée comme expliquée dans §8.3.1. Les bornes inférieures des sections sont : $0\mu$m, $20\mu$m et $40\mu$m. Le nombre de sections est en adéquation avec les contraintes de temps de calcul imposées pour de futures simulations industrielles. Cette étude valide donc la méthode MF ainsi que le schéma SRST dans un contexte 1D présentant des phénomènes de convection et une dynamique des échanges de masse et d'énergie complexes. Les précédentes vérifications numériques effectuées dans §8.3.1 et §9.2.3 sont étendues ici.

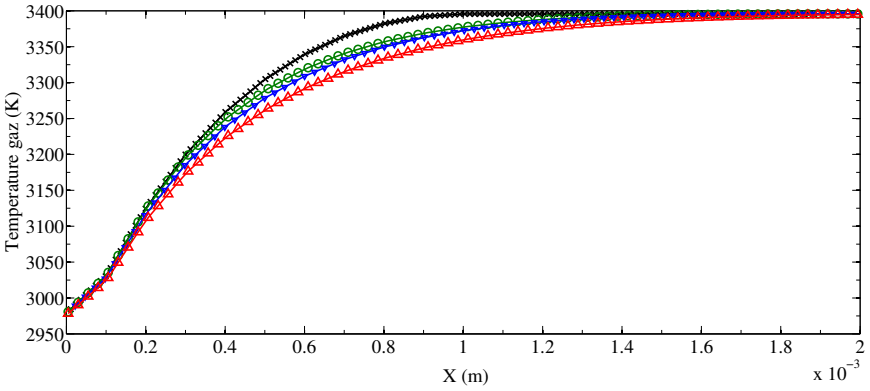


**FIGURE 11.13** – *Evolution spatiale de la température du gaz pour la configuration LP10. Résultats pour la distribution monodisperse : $-\times-$, la distribution Monomodale 1 : $-\circ-$, la distribution Monomodale 2 : $-\nabla-$ et la distribution Monomodale 3 : $-\Delta-$*

Dans un premier temps, nous validons la méthode MF et le schéma SRST pour les trois calculs monomodaux en vérifiant que la température de fin combustion est bien atteinte. Nous constatons tout de suite que le profil thermique ne subit pas de changement significatif avec des distributions continues et larges comme cela est illustré en Fig.(11.13). L'évolution spatiale de la température est d'autant plus lente que la distribution considérée est large ; il n'y pas pas d'effet de seuil qui témoigne d'un changement radical de dynamique à partir d'une certaine valeur de l'écart-type. Des différences sont observables pour l'évolution de la concentration massique de la phase condensée

qui est donnée en Fig.(11.14). Entre l'approche monodisperse et les distributions monomodales 1 et 2, on relève un épaississement de la zone de combustion de plus de 50%. Pour la répartition 3, qui est la plus plate, l'étendue de la zone de combustion est plus que doublée. Si cela semble important, les conséquences sont moins notables sur le profil thermique puisque l'écart maximal entre les deux courbes de température est d'environ 70K. Cet écart est relativement faible par rapport à l'élévation de température entre le début et la fin de la combustion qui de 486K.

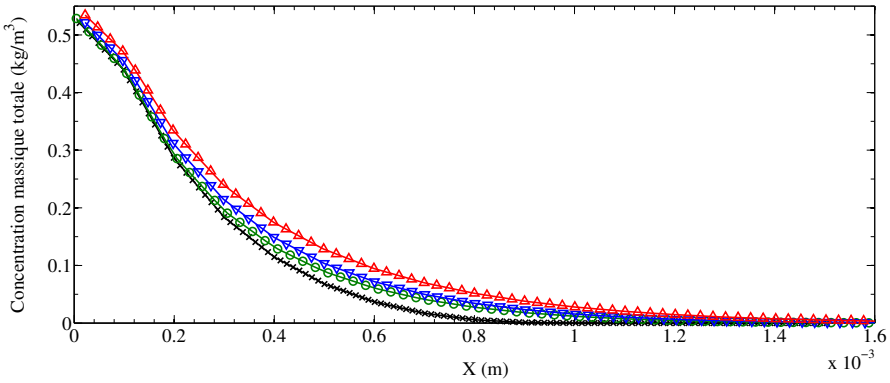


**FIGURE 11.14** – *Evolution spatiale de la concentration massique totale de la phase dispersée pour la configuration LP10. Résultats pour la distribution monodisperse : − × −, la distribution Monomodale 1 : − ○ −, la distribution Monomodale 2 : −▽− et la distribution Monomodale 3 : −△−*

Finalement, nous avons bien identifié un effet de l'étalement de la distribution mais il n'est pas aussi important que celui relevé par un changement de modèles ou encore le passage d'une granulométrie bidisperse à monodisperse. Le caractère régulier de la distribution lognormale, même si elle peut être étendue, n'induit pas un changement significatif de la dynamique de combustion. La zone de combustion est certes épaissie mais le profil thermique est peu modifié. Il est assez difficile d'évaluer les conséquences possibles sur un calcul d'instabilités. Notons aussi que cette étude a été réalisée avec le modèle ASSM et pour des gouttes monocomposants. Des différences plus marquées sont envisageables pour un autre modèle de combustion et une approche bicomposant.

## Conclusion du chapitre 11

Dans ce chapitre, nous avons validé les méthodes MC et MF ainsi que la stratégie de splitting dans le contexte de simulations diphasiques 1D réactives. Cette vérification a été faite pour trois modèles de combustion qui présentent des dynamiques différentes et deux descriptions de la phase gazeuse, à savoir monoespèce et biespèce.
Le comportement des modèles a été analysé. Il en ressort que la nouvelle approche basée sur la diffusion des espèces est particulièrement intéressante. Elle est, en effet, plus représentative de la physique des transferts de masse observée en propulsion solide mais reste toutefois à consolider et, surtout, à valider, comme d'ailleurs les autres modèles, par rapport à des résultats d'expériences menées en ambiances représentatives.
Notre étude s'est aussi portée sur le choix d'un maillage pour une description précise des évolutions spatiales des variables du problème. Nous avons montré qu'un maillage trop grossier épaissit significativement la zone de combustion et fausse son profil thermique. Cette situation est plus particulièrement observable pour les plus petites gouttes. Il n'est pas toujours possible de raffiner le maillage car cela induit de fortes contraintes sur le pas de temps, incompatibles avec les temps de calculs envisagés pour des simulations industrielles. Notons que la question se posera avec plus d'acuité pour des propergols chargés en particules nanométriques.
Nous avons également remarqué une décorrélation entre la dynamique de combustion des gouttes isolées et celle des agglomérats. Ce constat fait, on pourrait en déduire qu'il est possible de réaliser des calculs diphasiques en supposant que les plus petites gouttes ont instantanément brûlées. Néanmoins, on observe aussi des écarts importants sur le profil thermique en proche paroi. Aussi, faut-il rester prudent à ce stade et, avant de conclure, il convient de déterminer si ces écarts peuvent constituer une source majeure de modification du couplage aéroacoustique au sein du moteur. Ainsi, nous reprenons les paramètres de calculs donnés dans §11.1.3 pour la granulométrie P230 dans le chapitre 13 afin de proposer des calculs de démonstration de l'impact de la combustion distribuée sur les ODP. Dans l'optique de futures études sur l'ITHAC, il est aussi possible de se demander

quelles seraient les conséquences d'une telle approximation du profil thermique dans la zone de combustion. Dans l'étude finale de ce chapitre, nous avons aussi identifié une contribution de la polydispersion sur la dynamique de combustion même si cette dernière n'est pas significativement altérée. Dans le chapitre 12, nous reprenons ces conditions de calculs dans le cadre de simulations 2D réactives sur la configuration LP10. Ce chapitre est consacré plus particulièrement à la validation et à l'évaluation de la méthode MF et de la stratégie de splitting pour des simulations instationnaires.

# Chapitre 12

# Calculs diphasiques réactifs pour la validation de la méthode Multi-Fluide

*Ce chapitre se compose de simulations diphasiques réactifs opérées sur trois configurations MPS. Pour chaque étude, la configuration et les paramètres numériques sont détaillés. Les deux premiers calculs ont pour objectif la validation finale des différentes stratégies numériques présentées et préliminairement analysées dans la partie III dans un contexte 1D. Cette validation est ici étendue à un cadre 2D ainsi qu'à des conditions de fonctionnement moteur représentatives des phénomènes physiques rencontrés en propulsion solide. Ces simulations valident également l'implémentation des méthodes développées dans le code CEDRE. Les deux premières parties du chapitre visent à :*
*1- Comparer les méthodes eulériennes MC et MF et évaluer la stratégie de splitting.*
*2- Valider le schéma SRST dans un contexte multidimensionnel et par l'utilisation d'une loi d'évaporation basée sur la diffusion des espèces.*
*3- Analyser la faisabilité de l'approche MF pour la combustion des gouttes d'aluminium. Après avoir souligné l'efficacité des méthodes eulériennes, nous proposons dans une troisième partie une étude de sensibilité des niveaux d'instabilité fonction de la polydispersion en taille des gouttes d'aluminium. Réalisé à partir de la configuration LP10, nous considérons une combustion totale des gouttes i.e. en supposant l'absence d'alumine en début de combustion et une consommation complète de l'aluminium. Ainsi, en l'absence de résidus d'alumine dans la chambre, nous décorrélons l'impact de la combustion de celle des particules inertes sur l'écoulement. Ces simulations constituent un prélude à l'analyse proposée dans le chapitre 13 avec des gouttes bicomposants.*

## 12.1 Cas test TEU évaporant pour la validation de la stratégie de splitting et de l'approche Multi-Fluide

### 12.1.1 Détails de la configuration moteur et des mises en données numériques

Le cas test TEU repose sur une configuration de moteur simplifiée 2D axisymétrique [Dupays, 2002b] qui a été développée en première approche pour valider les solveurs diphasiques. Dans cette étude, il s'agit d'un cas test purement numérique pour lequel des gouttes d'eau sont évaporées en utilisant le modèle où l'évaporation est contrôlée par la diffusion des espèces présenté dans §3.4.2.2. Un maillage structuré-déformé de 8640 cellules est utilisé. La simulation présentée débute à partir d'un calcul préliminaire diphasique stationnaire dont l'objectif est d'amorcer la tuyère et d'atteindre les conditions de fonctionnement du moteur. Initialement le moteur contient de l'air sec ($Y_{air} = 1$ et $Y_{vap} = 0$) à la température de 1000K. Deux espèces sont considérées dans cette étude, de l'air et de la vapeur d'eau. De l'air sec est injecté axialement à une température de 1000K et avec un débit surfacique massique de 39kg/m$^2$/s comme illustré dans la Fig.(12.2). Le mélange injecté est de l'air sec tel que : $Y_{air} = 1.0$ et $Y_{vap} = 0.0$.
Les particules sont aussi injectées de manière axiale à la température de 300K. La polydispersion en taille est décrite par une distribution lognormale $L_s$, donnée en Eq.(8.28). La NDF est définie sur l'intervalle fini $d \in [\,0\,\mu\text{m}\,;\,20\,\mu\text{m}\,]$. Les paramètres de la distribution sont : $\sigma_{ln} = 0.4$, $\mu_{ln} =$

$2.79\,10^{-10}$. Le débit total surfacique pour la phase dispersée est $1.0\text{kg/m}^2\text{/s}$, ce qui représente 2.5% du débit total gaz plus gouttes.
Les méthodes Multi-Classe et Multi-Fluide (affine et exponentielle) sont utilisées. La discrétisation de l'espace des tailles est effectuée avec 5 sections/samples ce qui est un nombre raisonnable pour un calcul industriel. Le choix d'un découpage $\Delta r$ constant semble approprié comme conseillé dans §8.3.1. Les conditions d'injection pour les particules sont données dans Tab.(12.1).

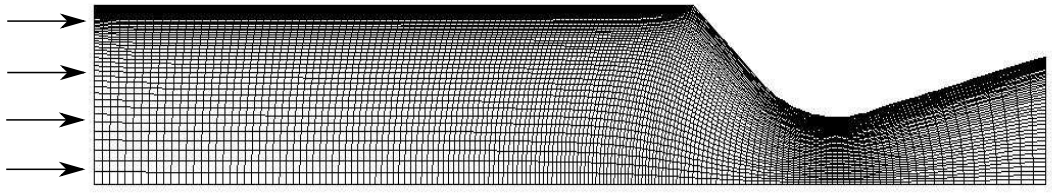

**FIGURE 12.1** – *La configuration TEU : un maillage structuré-déformé avec injection axiale de gaz et de particules au fond avant*

**TABLE 12.1** – *Conditions d'injection des particules dans le cas TEU*

| | Intervalle de la section ($\mu$m) | $d_{30}$ ($\mu$m) | Débit ($\text{kg/m}^2\text{/s}$) |
|---|---|---|---|
| Sample/Section 1 | $[0.0, 4.0[$ | 3.84 | $5.\,10^{-7}$ |
| Sample/Section 2 | $[4.0, 8.0[$ | 7.23 | $\approx 7.88\,10^{-2}$ |
| Sample/Section 3 | $[8.0, 12.0[$ | 9.85 | $\approx 6.512\,10^{-1}$ |
| Sample/Section 4 | $[12.0, 16.0[$ | 13.20 | $\approx 2.512\,10^{-1}$ |
| Sample/Section 5 | $[16.0, 20.0[$ | 17.01 | $\approx 1.95\,10^{-2}$ |

Nous proposons d'étudier un régime instationnaire en faisant fluctuer sinusoïdalement l'injection du débit gaz à la fréquence de 1500 Hz et une amplitude de 10% autour de la valeur moyenne : $D_g(t) = 39\,(1 + 0.05\sin(2\pi f t))$ $\text{kg/m}^2\text{/s}$.
Afin d'évaluer la stratégie de splitting, nous effectuons un calcul de référence, noté "ref", où une grande partie des échelles de temps, notamment celles de relaxation des particules, sont résolues. Ce calcul est réalisé en utilisant les méthodes MC et MF-affine. Le pas de temps est $\Delta t_{ref} = 1.10^{-7}s$. Un second calcul, noté "fast", est effectué avec un pas de temps : $\Delta t_{fast} = 1.10^{-6}s$, ce qui ne permet pas d'employer un schéma d'intégration explicite pour le transport de la phase gazeuse.
Pour l'ensemble des simulations présentées ci-dessus, le transport du gaz est résolu avec un schéma Runge-Kutta implicite (RKI2) avec une résolution spatiale d'ordre 2. Le transport de la phase dispersée utilise un schéma d'intégration explicite Runge-Kutta d'ordre 2 (RK2) et la résolution spatiale est d'ordre 2. Le traitement temporel des termes sources réactifs est effectué avec une méthode Runge-Kutta TVD d'ordre 3. Le nouveau schéma SRST est employé pour la méthode MF comme présenté dans Eq.(8.14). Les différents opérateurs sont intégrés suivant une stratégie de splitting de Strang comme présenté dans Eq.(7.6).

## 12.1.2 Comparaison des méthodes eulériennes et évaluation de l'intégration temporelle par splitting

### 12.1.2.1 Validation de l'approche MF, du schéma SRST et gain en temps de calcul de la reconstruction affine

Nous comparons les trois méthodes eulériennes pour la configuration "fast" en focalisant sur l'étude de la dynamique de l'évaporation du spray polydisperse. Comme illustré à la Fig(12.2), l'enthalpie totale du gaz décroît significativement selon la direction axiale. En effet, en l'absence de sources extérieures d'énergie, l'évaporation des gouttes d'eau nécessite un apport important de chaleur. Au vu des différents champs, les méthodes présentent des comportements équivalents. Conséquence de l'injection débitante sinusoïdale, nous observons des structures hydrodynamiques cohérentes. Leur maximum et leur position dans la chambre sont les mêmes pour les trois simulations. De plus, comme présenté dans la Fig.(12.2), un senseur de pression, noté S, est placé dans la chambre pour vérifier que la fréquence d'injection est bien égale à 1500Hz ce qui est bien confirmé dans notre étude. Les pressions moyennes de la chambre sont égales à $P_{moy} = 2.21\,10^5$Pa avec une erreur relative inférieure à 1%.
Les champs de concentration volumique du spray sont aussi fortement comparables ce qui souligne que 5 samples/sections offrent une discrétisation de l'espace des tailles suffisante pour décrire l'éva-

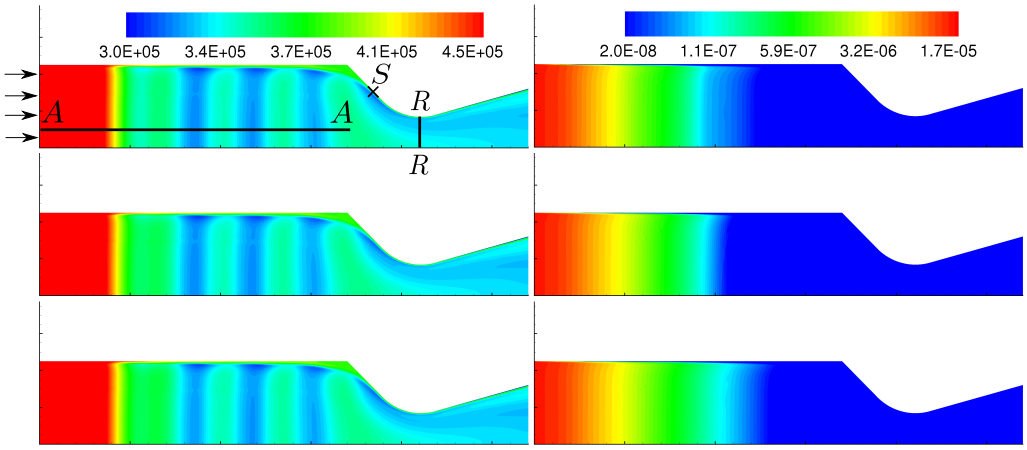


**FIGURE 12.2** – *Comparaisons entre les différentes méthodes eulériennes pour la simulation "fast" : MC (en haut) ; MF affine (au milieu) ; MF exponentielle (en bas). Champs instantanés pour l'enthalpie totale du gaz (à gauche) et pour la fraction volumique totale de l'ensemble des tailles de gouttes (à droite)*

poration du spray. Certaines différences sont toutefois notables en fin d'évaporation qui se produit au centre de la chambre. La méthode MF exponentielle présente un gradient moins fort pour la fraction volumique en comparaison des autres approches. En effet, la reconstruction exponentielle semble appropriée pour décrire la queue de distribution en fin d'évaporation ; elle introduit cependant une diffusion numérique dans l'espace des tailles plus importante. A contrario, l'approche affine présente une queue de distribution marquée par une valeur finie. En fin d'évaporation, ces différences sont à relativiser car les valeurs de fraction massique sont particulièrement faibles, ce qui entraîne un rétrocouplage faible vers le gaz en termes de transferts de quantité de mouvement et de chaleur.
Pour compléter cette étude, nous présentons en Fig.(12.3), deux coupes sur les champs instantanés : une coupe axiale A-A et une coupe radiale R-R. Concernant la première, les évolutions de la température du gaz et de la fraction volumique totale du spray sont parfaitement observables. Nous vérifions que les résultats sont très proches entre les méthodes MF et MC. La validation de la méthode MF affine et du schéma SRST est donc assurée pour un cas 2D multiespèce et un modèle d'évaporation représentatif.

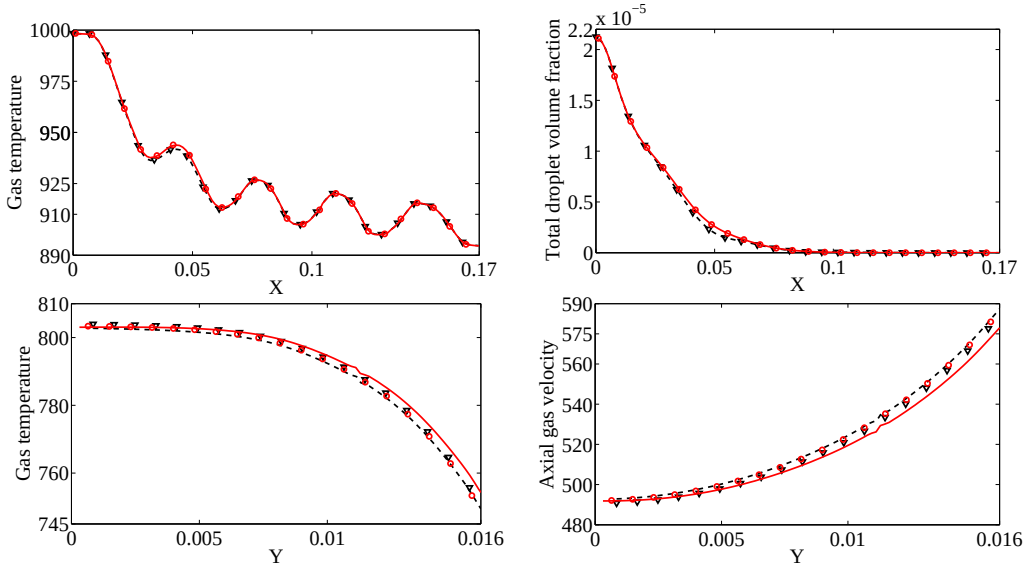


**FIGURE 12.3** – *Comparaisons entre les simulations "fast" et "ref" : coupe axiale A-A (en haut) et coupe radiale R-R (en bas). Résultats pour la méthode MC : —— : "ref" ; ▽ : "fast". Résultats pour la méthode MF affine : – – – : "ref" ; ○ : "fast"*

Nous souhaitons maintenant mettre en lumière le gain effectif en temps CPU de la reconstruction affine par rapport à l'exponentielle. En comparant les temps de calcul des méthodes MF par rapport à l'approche MC, les premières sont défavorisées puisqu'elles nécessitent des calculs supplémentaires

tels les flux entre sections et les intégrations intra-sectionnelles. Il est toutefois intéressant d'étudier l'apport de la représentation affine. Alors que le coût de calcul total est 4.1 fois plus élevé pour la méthode MF exponentielle par rapport à la MC, il est presque réduit de moitié en utilisant la reconstruction affine. Ce résultat est d'autant plus remarquable que les temps de calcul présentés sont des coûts globaux tenant compte de la résolution du transport de la phase gazeuse, celle de la phase condensée et l'intégration des termes sources de couplage. Le choix d'une fonction de forme appropriée rend la méthode MF à deux moments en taille attractive dans l'optique d'un calcul industriel.

**TABLE 12.2** – *Temps de calcul globaux des simulations "fast" avec les méthodes MF et MC*

| | Multi-Classe | MF affine | MF exponentielle |
|---|---|---|---|
| Temps ($10^4$s) | 3.18 | 7.27 | 13.12 |

#### 12.1.2.2 Etude de la stratégie de splitting

Cette étude illustre un des apports de la stratégie de splitting à savoir le maintien d'un niveau de précision globale de la solution même quand certaines échelles de temps ne sont pas résolues. Pour la configuration "ref", les gouttes ayant un diamètre supérieur à 500nm possèdent des temps de relaxation inférieurs au pas de temps. Cela implique que les interactions entre le gaz et ces gouttes doivent être correctement capturées. Dans la configuration "fast", le pas de temps ne permet pas de résoudre des temps caractéristiques pour des diamètres de goutte inférieurs à $1.5\,\mu$m.
Des essais ont été tentés avec des pas de temps plus grands mais ils ont conduit à des problèmes de stabilité. Ces derniers trouvent leur source dans la résolution explicite des termes sources de traînée et d'échange de chaleur. La résolution des échanges de masse n'est pas en cause car la limite du CFL évaporant pour le schéma n'a pas été atteint.
En comparant les résultats de la Fig.(12.3), nous mettons en évidence la précision de la stratégie de splitting pour un pas de temps relativement grand. La coupe A-A n'illustre pas de différences majeures sur la dynamique de l'évaporation. La coupe R-R confirme cette observation. Étant faite au niveau de la tuyère, l'ensemble des erreurs introduites dans la chambre du moteur et celles venant de la non résolution des temps convectifs, particulièrement rapides dans cette zone, devraient se cumuler. Or les différences sur la température et la vitesse axiale du gaz sont mineures et n'excèdent pas 1%.

## 12.2 Calcul P230 avec combustion des gouttes : faisabilité de la méthode MF conditionnée en taille

Afin de tester la méthode MF dans le contexte d'un calcul MPS présentant de la combustion de gouttes, nous reprenons l'étude numérique proposée dans [Lupoglazoff et al., 2002] sur une géométrie du moteur P230 avec le code SIERRA. Dans cet article, l'objectif était de mettre en évidence le rôle de la combustion distribuée sur les ODP en effectuant une comparaison de calculs monophasiques et diphasiques réactifs. Dans le calcul monophasique, les gouttes sont supposées avoir brûlées instantanément à la surface et les résidus sont modélisés à l'aide d'une approche Gaz Equivalent comme cela est expliqué dans §3.3.3. Les simulations diphasiques, réalisées avec la méthode MC, ne considéraient que la combustion des agglomérats donc une seule taille de gouttes. Nous étendons et améliorons cette étude en considérant une distribution bidisperse pour laquelle il est possible de valider la méthode MF par comparaison avec l'approche MC. Aussi, cette étude offre une autre validation de la stratégie de splitting pour une configuration moteur où la polydispersion en taille et le taux de chargement sont particulièrement élevés. Dans de récentes contributions en propulsion solide [Najjar et al., 2006; Attili et al., 2009], une approche lagrangienne a été employée pour décrire la combustion des gouttes et une équation de convection-diffusion utilisant un formalisme eulérien a été choisie pour traiter les résidus d'alumine, considérés comme des fumées (ou smoke particles en anglais). L'étude suivante renforce l'idée qu'une approche eulérienne globale basée sur une méthode MF, décrivant l'ensemble du spectre des tailles, est pertinente pour des calculs de gouttes en combustion et le suivi de leurs résidus.

### 12.2.1 Rappel des points clés du moteur P230

La configuration étudiée représente la géométrie interne du moteur P230 après 95s de combustion. A cet instant, le segment étoilé au fond avant a entièrement brûlé. Seuls les deux chargements cylindro-coniques débitent encore. La distribution en taille des gouttes injectées à la surface des deux chargements est typiquement bimodale. Bien que la combustion des gouttes se passe dans un volume réduit, l'énergie libérée dans la zone de combustion distribuée peut impacter significativement l'hydrodynamique et l'acoustique comme évoqué dans §2.2.1.2. Dans ce moteur, le rapport d'allongement [Chedevergne, 2007] entraîne l'apparition du Vortex Shedding Pariétal et la présence de protections thermiques dans l'écoulement est également à l'origine du développement d'un Vortex Shedding d'Obstacle.

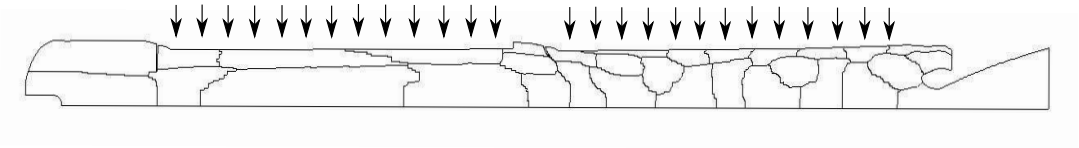

**FIGURE 12.4** – *Configuration P230 et sa décomposition en 32 domaines, et illustration par des flèches de la surface d'injection du gaz et des gouttes*

### 12.2.2 Configuration numérique

La configuration numérique est établie sur un maillage 2D axisymétrique structuré-déformé de 68 500 cellules, le même que celui utilisé dans [Lupoglazoff et al., 2002]. Ce calcul est parallélisé sur 32 processeurs. La simulation diphasique débute à partir d'un pré-calcul en gaz seul qui a permis l'amorçage de la tuyère et la montée en pression au sein de la chambre. Les gouttes d'aluminium sont injectées depuis la surface de combustion comme illustré par la Fig.(12.4). Le débit massique total de la phase dispersée représente 18% du débit total gaz plus gouttes ce qui correspond au chargement de la Butalane d'Ariane 5. Il s'agit ici d'étudier une distribution bidisperse constituée pour les deux tiers de la masse de gouttes isolées de diamètre $d_1 = 30\mu$m et pour le tiers restant d'agglomérats de diamètre $d_2 = 125\mu$m. Reprenant les conditions de calcul de l'étude décrite dans [Lupoglazoff et al., 2002], la nature bicomposant des gouttes n'est pas prise en compte. Ainsi, la masse volumique moyenne des gouttes est constante.
Le modèle de combustion est le modèle ASSM présenté dans §2.4.1.2. Les gouttes brûlent jusqu'à atteindre leurs tailles de résidus respectifs $d_{1,res} = 3\mu$m and $d_{2,res} = 60\mu$m. L'évolution de la taille des gouttes en combustion revient donc à suivre de façon lagrangienne deux fonctions Dirac dans l'espace des phases. La méthode MC semble appropriée pour décrire une telle évolution.

Tous les autres paramètres numériques étant fixés, nous proposons de valider l'approche TSM-MF, dans un contexte qui ne lui est pas favorable, sur deux points : 1- La diffusion dans l'espace des phases ne permet normalement pas d'obtenir une fonction de type Dirac en fin de combustion. 2- Au cours de la combustion, l'approche affine ne permet pas de rendre compte exactement de la physique d'une distribution de masse de Dirac qui est convectée dans l'espace des tailles. Afin d'obtenir les tailles de résidus exactes en fin de combustion, le schéma SRST est modifié. A cet effet, les bornes des sections ont été choisies judicieusement afin de piloter les flux entre sections et obtenir une reconstruction affine proche d'une borne et approximant au mieux une distribution monodisperse. Quatre sections sont employées ici, soit deux pour suivre les deux tailles de gouttes initiales. Une illustration de cette stratégie numérique est fournie en Fig.(12.5). Bien que ce cas d'étude soit une validation particulièrement contraignante pour les méthodes MF, elle souligne leur flexibilité pour décrire tous types de distributions et leur évolution.
Le temps de simulation est de 3s ce qui est suffisamment long pour réaliser une étude fréquentielle des instabilités ; une précision d'1/3Hz est pertinente pour étudier le premier mode acoustique se situant autour de 20Hz. Le pas de temps utilisé est $1\mu$s. La stratégie de couplage est la méthode de splitting de Lie présentée dans §7.1.4.1.
Pour le maillage donné et les conditions de l'écoulement, une intégration temporelle explicite RK2 et une résolution d'ordre 2 en espace du transport de la phase gazeuse et de l'acoustique sont proposées. Le $\text{CFL}_g$ maximal rencontré dans le domaine est égal à 0.3. La convection de la phase liquide est aussi intégrée explicitement avec un schéma RK2 et une méthode d'ordre 2 en espace. L'intégration des termes sources est faite avec des schémas RK2-TVD pour les méthodes MC et MF.

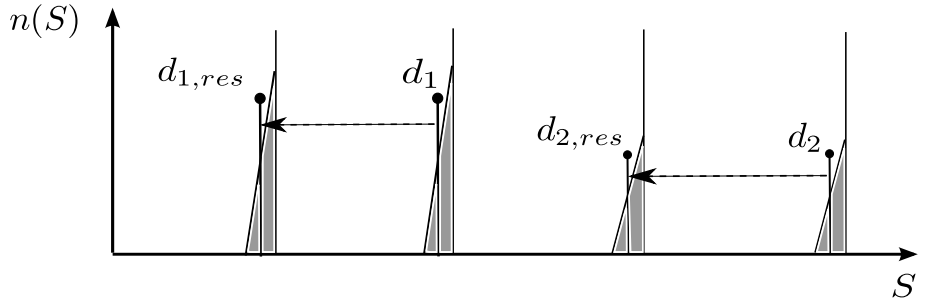


**FIGURE 12.5** – *Discrétisation spécifique de l'espace des tailles pour la mise en données du modèle MF avec combustion des gouttes*

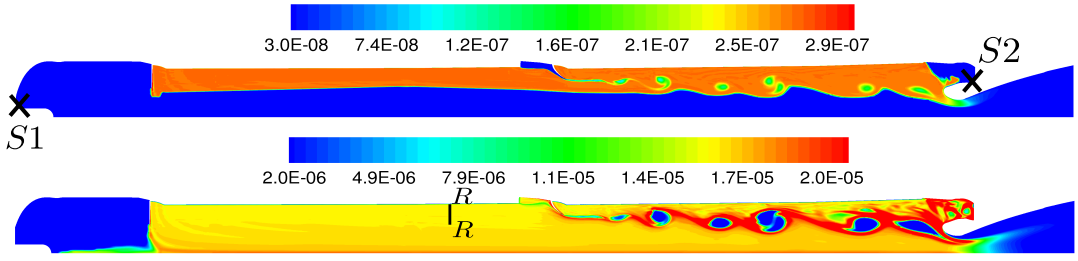


**FIGURE 12.6** – *Résultats pour la méthode MF affine : champs instantanés de la fraction volumique des résidus d'alumine pour les tailles $d_{1,res}$ (en haut) et $d_{2,res}$ (en bas)*

### 12.2.3 Etude de la combustion sur les instabilités moteur

Nous étudions en particulier la dynamique de la combustion des gouttes sur les niveaux d'instabilités et la production des résidus. Comme illustré en Fig.(12.6), une coupe radiale R-R est réalisée dans la zone de combustion. Les résultats sont donnés en Fig.(12.7) ; nous obtenons la même température de fin de combustion ce qui valide le schéma SRST modifié apte ainsi à retrouver le bon dégagement d'énergie. La dynamique de la combustion présente toutefois des différences. En utilisant la méthode MF, l'épaisseur de la zone de combustion est 30% plus importante que celle calculée avec la méthode MC. Ce résultat n'est pas surprenant dans la mesure où l'emploi d'une seule section pour chaque taille de gouttes pour traiter les transferts de masse dans l'espace des tailles introduit une diffusion numérique importante. Néanmoins, les différences sur l'évolution de

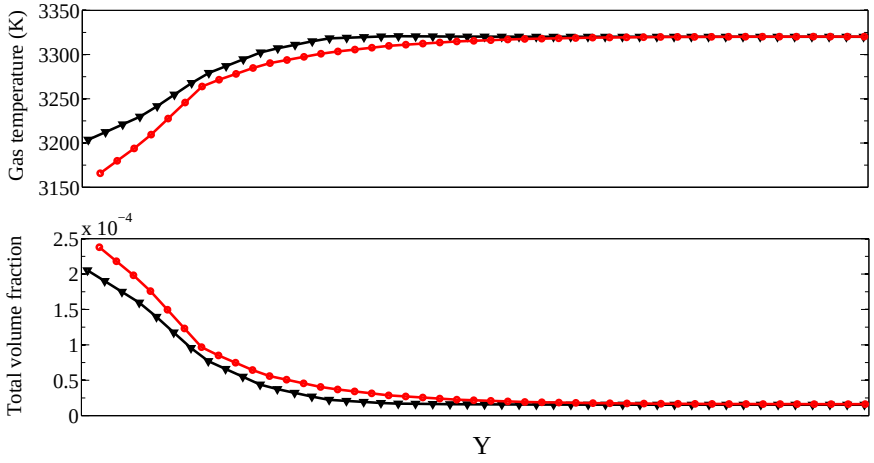


**FIGURE 12.7** – *Comparaisons entre les méthodes MC et MF affine : étude de la coupe radiale R-R au sein de l'épaisseur de la combustion distribuée. Résultats pour la méthode MC : —▽— et pour la méthode MF affine : —○—*

la température du gaz ne sont pas si importantes ; l'écart maximal entre les courbes rapporté à la valeur de la température finale ne dépasse pas 15%. Les résultats sont semblables pour l'évolution de la fraction volumique totale des gouttes.

**TABLE 12.3** – *Comparaisons sur les amplitudes des instabilités et sur les pressions moyennes (valeurs adimensionnées) pour les différentes méthodes eulériennes*

| | Capteur S1 | Capteur S2 |
|---|---|---|
| $P_{moy}$ MC | 100.00 | 100.00 |
| $P_{moy}$ MF affine | 99.97 | 99.98 |
| $\Delta P/P_{moy}$ MC | 2.4% | 3.9% |
| $\Delta P/P_{moy}$ MF affine | 2.0% | 3.7% |

Les résidus d'alumine se répartissent différemment dans le moteur en fonction de leur taille et de leur temps de relaxation. Les plus petits $d_{1,res}$ tendent à suivre les fluctuations de la phase gazeuse plus rapidement que les résidus $d_{2,res}$ qui sont plus inertiels. Ces derniers se retrouvent d'ailleurs piégés dans le fond arrière du moteur car ils n'ont pas été entrainés par la phase gazeuse au niveau du convergent de la tuyère. La différence de dynamique entre les deux tailles de résidus est significative car pour un rapport $d_{2,res}/d_{1,res} = 20$, le temps de relaxation des plus gros résidus est plus de 400 fois supérieurs à celui des plus petits. Comme illustré en Fig.(12.6), les champs instantanés des fractions volumiques des deux tailles de résidus soulignent des différences majeures sur leur position au sein de la chambre et des structures tourbillonnaires. Les résidus $d_{2,res}$ ont tendance à être éjectés des tourbillons. Les échanges de quantité de mouvement et d'énergie entre les phases ont alors lieu dans des zones privilégiées de l'écoulement. Cela justifie le fait que certaines tailles de gouttes renforcent les structures cohérentes alors que d'autres tendent à les dissiper. Les granulométries employées en propulsion solide étant étendues, le développement de méthodes aptes à décrire la polydispersion est pleinement justifié.

Pour valider la méthode MF, nous proposons une étude qualitative des instabilités de fonctionnement. Deux capteurs de pression S1 et S2 sont disposés respectivement au fond avant et au fond arrière du moteur comme illustré en Fig.(12.6). Les résultats sur les pressions moyennes $P_{moy}$ sont satisfaisants. En prenant la méthode MC comme référence diphasique, les écarts avec l'approche MF n'excèdent pas 3%. Les niveaux d'instabilités $\Delta P/P_{moy}$, plus pertinents, présentent très peu d'écarts. Les niveaux sont plus élevés de quelques pourcents avec la méthode MC. On peut alors se demander si, pour la configuration donnée, une épaisseur de combustion plus faible joue un rôle important ; cela ne semble pas être le cas ici.

Les spectres fréquentiels fournis en Fig.(12.8) sont similaires pour les deux méthodes eulériennes. Les spectres sont bruités, plus particulièrement au niveau de la première harmonique. Bien que des fluctuations de pression soient présentes, l'accrochage acoustique n'est pas marqué. Dans le cas du P230, cela signifie que le couplage entre le VSP et VSO n'a pas eu lieu. En effet, deux fréquences autour de 20Hz sont observables alors qu'une seule, de forte amplitude, devait apparaître quand le couplage aéroacoustique est total. C'est d'ailleurs la situation rencontrée dans la configuration numérique proposée dans [Lupoglazoff et al., 2002]. Les résultats diffèrent dans notre étude mais

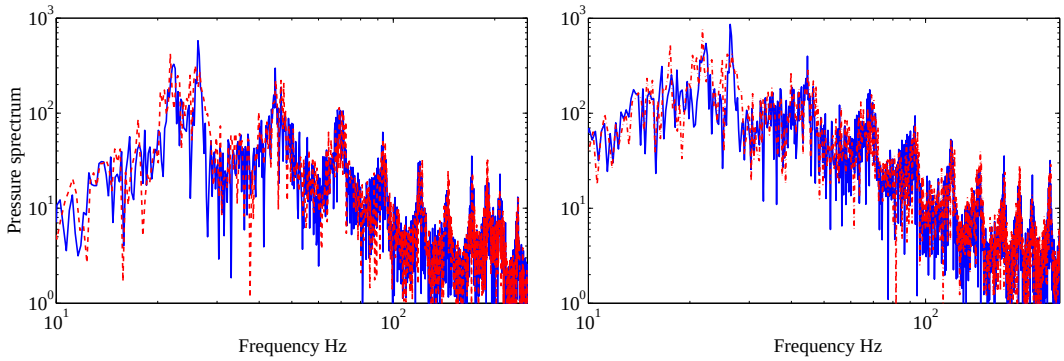


**FIGURE 12.8** – *FFT (échelles logarithmiques) des signaux de pression pour les capteurs S1 (à gauche) et S2 (à droite). Résultats pour les méthodes MC : – – – et MF affine : —*

il faut noter que la mise en données a été modifiée sur deux points : 1- La concentration massique des gouttes était limité à 10% du débit total, elle est ici porté à sa valeur réelle de 18%. 2- Seules des simulations monodisperses pour les agglomérats $d_2$ ont été réalisées auparavant, alors qu'ici est pris en compte l'influence simultanée de la combustion des gouttes isolées et des agglomérats. Les résultats montrent donc l'importance de prendre en compte tout le spectre des tailles de gouttes pour étudier des interactions complexes entre l'acoustique, les structures hydrodynamiques et la phase dispersée réactive.

## 12.3 Calcul LP10 avec combustion complète des gouttes d'aluminium : Etude de la polydispersion

### 12.3.1 Présentation de l'étude et de la configuration numérique pour la granulométrie 20$\mu$m

La configuration numérique est basée sur un maillage 2D axisymétrique structuré-déformé de 110 060 cellules comme illustré en Fig.(12.9). Le calcul est parallélisé sur 32 processeurs. La simulation diphasique débute à partir d'un pré-calcul en gaz seul qui a permis l'amorçage de la tuyère et la montée en pression au sein de la chambre.

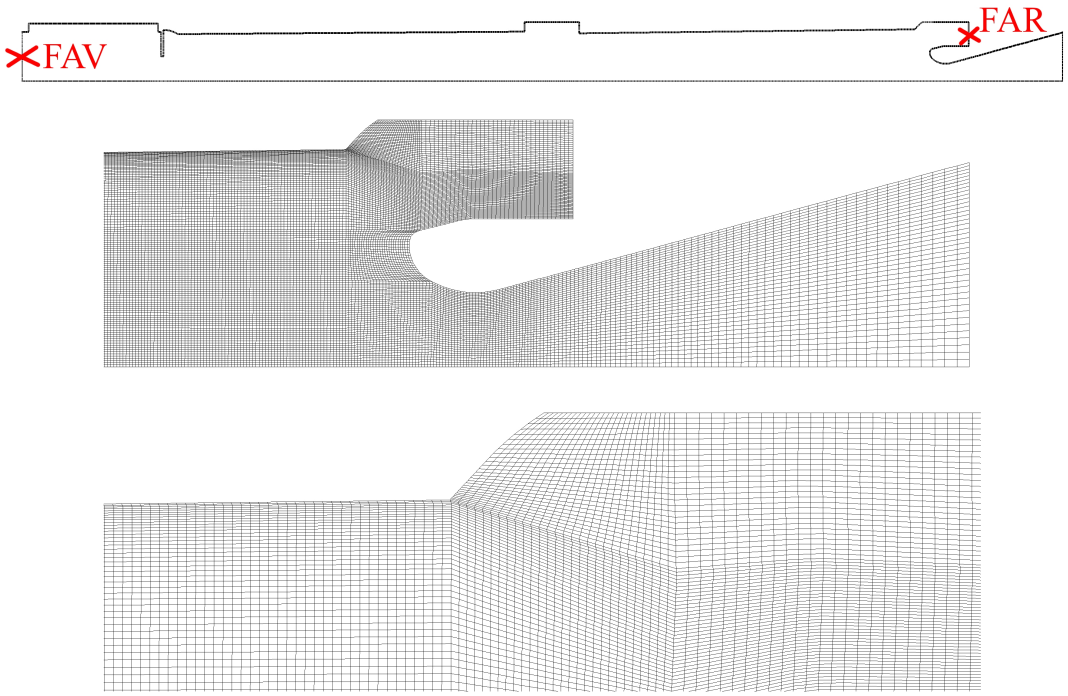


**FIGURE 12.9** – *Maillage structuré-déformé de la configuration LP10. Vue globale du moteur et position des capteurs (en haut), vue du fond arrière et de la tuyère (au milieu) et vue de la fin du second segment de propergol (en bas)*

Les gouttes d'aluminium sont injectées depuis la surface de combustion avec une condition à la limite de type débit imposé. Nous reprenons les paramètres utilisés dans l'étude réalisée dans §11.2 pour le modèle ASSM au cours de laquelle nous avons mis à l'échelle la granulométrie P230 pour la configuration LP10. Nous avons montré qu'un maillage trop grossier ne permettait pas de décrire correctement la zone de combustion des gouttes isolées. Or, dans notre étude, le maillage LP10 présente des tailles de cellules, de l'ordre de 100$\mu$m proche de la surface du propergol, ce qui n'est pas assez raffiné. Dans l'optique de restituer correctement les interactions entre la phase gazeuse et les gouttes en combustion, nous considérons uniquement la combustion des agglomérats $d = 20\mu$m. On rappelle que cette taille de gouttes correspond à une mise à l'échelle des agglomérats de $d = 120\mu$m de la configuration P230 comme expliqué dans §11.2. Ces gouttes représentent 6% du débit total gaz plus gouttes. Nous étendons donc l'analyse numérique 1D présentée dans §11.2.3 portant sur la combustion de distributions monodisperse et monomodale à l'étude des instabilités moteurs. Synthétisées dans le Tab.(12.4), trois simulations sont réalisées :

– Un calcul GE monophasique : la combustion des gouttes isolées et des agglomérats est instantanée. L'écoulement est modélisé à l'aide d'une approche Gaz Equivalent. Les niveaux d'instabilités n'ont pour origine que le couplage aéroacoutique de l'écoulement interne.

– Un calcul Monodisperse MC : la combustion des gouttes isolées est instantanée. La combustion distribuée des agglomérats est prise en compte et il n'y a pas de résidus. La phase dispersée est modélisée avec la méthode MC. Les niveaux d'ODP sont potentiellement impactés par la combustion distribuée d'une phase monodisperse.

– Un calcul Monomodale MF : l'objectif de cette configuration est le même que pour le cas Monodisperse MC mais l'analyse est faite avec une distribution monomodale lognormale. Nous reprenons les paramètres de la granulométrie la plus étendue étudiée dans §11.2.3. Il s'agit de la distribution Monomodale 3 dans le Tab.(11.8) et représenté dans la Fig.(12.10). La phase dispersée est modélisée avec la méthode TSM-MF affine.

**TABLE 12.4** – *Tableau récapitulation des calculs LP10 monophasique et diphasiques réactifs avec le modèle de combustion ASSM*

| Nom de l'étude | Détails | Objectifs |
|---|---|---|
| Monodisperse MC | Combustion distribuée des agglomérats<br>Distribution discrète->1 Dirac<br>Sans résidus | Calcul complet |
| Monomodale MF | Combustion distribuée des agglomérats<br>Distribution continue->Lognormale<br>Sans résidus | Calcul complet<br>Etude d'une<br>polydispersion continue |
| GE | Combustion instantanée<br>Sans résidus | Référence monophasique<br>Sans combustion distribuée |

Concernant l'analyse de la méthode de splitting, nous reprenons la stratégie de validation adoptée dans §12.1 en réalisant, pour chaque cas d'étude, deux simulations avec deux pas de temps. Nous effectuons un calcul de référence, noté "ref", où une grande partie des échelles de temps est résolue. Ce calcul est réalisé avec les méthodes MC et MF. Le premier pas de temps est $\Delta t_{ref} = 2.10^{-7}$s. Un second calcul, noté "fast", est effectué avec le pas de temps $\Delta t_{fast} = 1.10^{-6}$s. Pour les deux pas de temps, une intégration explicite de la phase gazeuse n'est pas envisageable car le $CFL_g$ maximal rencontré dans le domaine est environ de 0,5 pour le calcul de référence et de l'ordre de 5 pour le calcul "fast".
Le temps de simulation est de 0.2s ce qui est suffisamment long pour réaliser une étude fréquentielle des instabilités. Une précision de 5Hz est pertinente pour étudier le premier mode acoustique se situant autour de 700Hz. Comme indiqué dans la Fig.(12.9), deux capteurs de pression noté FAR et FAV sont disposés respectivement au fond avant et au fond arrière du LP10.
La stratégie de couplage est la méthode de splitting de Strang présentée dans §7.1.4.1. Une intégration temporelle Euler implicite et une résolution d'ordre 2 en espace du transport de la phase gazeuse et de l'acoustique sont proposées. La convection de la phase liquide est traitée explicitement avec un schéma RK2 et une méthode d'ordre 2 en espace. L'intégration des termes sources est faite avec un schéma explicite RK2-TVD.

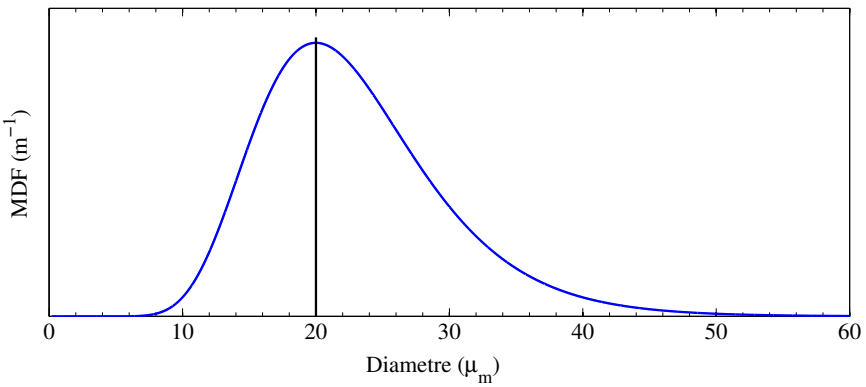


**FIGURE 12.10** – *Distributions monodisperse et monomodale lognormale avec un mode $d = 20\mu m$ (maximum de la concentration massique)*

### 12.3.2 Etude de l'écoulement et analyse fréquentielle pour la granulométrie 20$\mu$m

Nous étudions, dans un premier temps, la dynamique de la combustion des agglomérats sur le maillage LP10 en comparant les résultats des calculs "ref" à ceux établis dans §11.2.3. Comme illustré en Fig.(12.11) avec l'évolution spatiale de la fraction volumique des gouttes, nous relevons une épaisseur de combustion deux fois plus importante avec la distribution monomodale qu'avec l'approche monodisperse. Cette observation confirme la dynamique obtenue dans les simulations 1D. Nous vérifions que la température de fin de combustion est correcte pour les deux méthodes eulériennes. Finalement, nous validons que le maillage est suffisamment raffinée dans la zone de combustion : on retrouve respectivement 8 et 13 rangées de cellules pour décrire les échanges entre le gaz et les distributions monodisperse et monomodale. La même analyse a été faite avec les simulations "fast" ; il en résulte que ni l'étendue de la zone de combustion ni le profil thermique en son sein n'ont été modifiés. Les temps caractéristiques des gouttes ayant un diamètre inférieur à 1.1$\mu$m sont plus rapides que le pas de temps $\Delta t_{fast} = 1.10^{-6}s$ ce qui laisse supposer que les interactions entre ces gouttes et la phase gazeuse ne sont pas correctement décrites. Cependant, la dynamique du couplage entre les deux phases n'est pas fortement impactée car pour des tailles de gouttes inférieures à 1$\mu$m, le nombre de Stokes est très inférieur à 1.

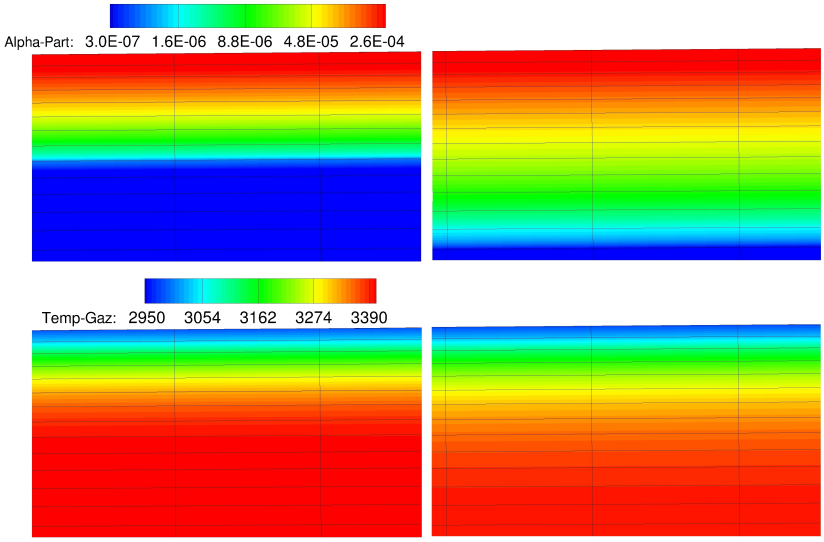


**FIGURE 12.11** – *Champs instantanés de la fraction volumique de la phase dispersée (en haut) et de la température du gaz (en bas). Configuration MC (à gauche) et MF (à droite) pour le calcul référence* $\Delta t = 2\,10^{-7}s$

Dans un second temps, nous étudions l'impact de la combustion distribuée sur la structure globale de l'écoulement. Présenté en Fig.(12.12) pour les simulations "ref", la norme du rotationnel est équivalent dans toutes les régions du moteur. Ainsi, le développement des structures tourbillonnaires depuis la surface du propergol, caractéristique du VSP, ne subit pas de changement notable par rapport au calcul GE que cela soit avec la granulométrie monodisperse ou la monomodale. Nous avions déjà constaté que la granulométrie lognormale n'impliquait pas de changement significatif sur le profil thermique. De plus, si l'épaisseur de combustion est plus étendue avec la granulométrie lognormale, la phase condensée ne représente pas une concentration massique très importante en fin de combustion. Il n'est donc pas étonnant d'obtenir des écoulements équivalents pour les deux calculs diphasiques. Néanmoins, il est plus surprenant de ne pas constater d'effet de la combustion distribuée par rapport au calcul GE. Rappelons que nous nous trouvons dans un cadre d'étude très spécifique pour lequel les gouttes brûlent totalement, il n'y a pas donc de contribution possible des résidus sur le reste de l'écoulement.
Pour les calculs "ref", l'analyse des niveaux d'instabilités, données en Tab.(12.5), confirme l'observation faite sur l'écoulement global à savoir aucun changement significatif des amplitudes d'ODP avec la combustion des gouttes. L'amplitude relative $\Delta P/P_{moy}$ pour le capteur FAR est de 0.86% pour le calcul GE et de 0.87% pour les deux granulométries. Des écarts un peu plus marqués sont relevés pour le capteur FAV avec 0.67% pour l'approche GE, 0.69% pour la distribution monodisperse et 0.73% pour la granulométrie lognormale. Pour la granulométrie 20$\mu$m, ces résultats ne soulignent donc pas un effet de seuil entre les simulations monophasique et diphasiques. L'aug-

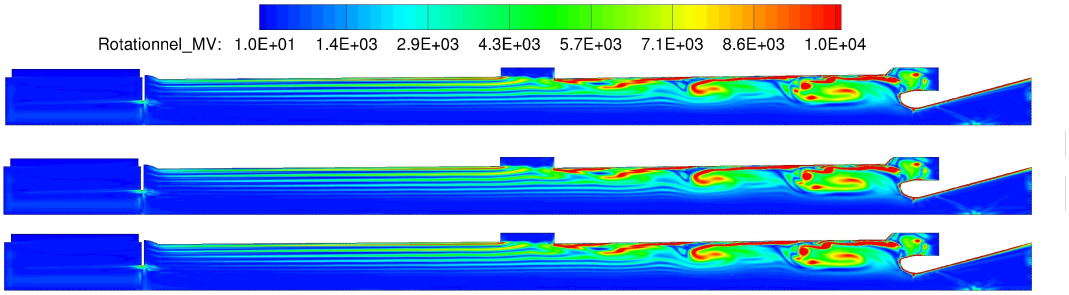


**FIGURE 12.12** – *Champs instantanés de la norme du rotationnel. Configurations GE (en haut), MC (au milieu) et MF (en bas) pour le cas référence* $\Delta t = 2.10^{-7} s$

mentation des niveaux du capteur FAV de l'ordre de 9% entre les calculs GE et monomodale MF laisse supposer une contribution de la combustion de certaines tailles de gouttes autres que celle de $20\mu$m. Nous proposons ainsi dans la partie suivante de réaliser deux autres calculs monodisperses afin d'identifier quelles granulométries modifient significativement la stabilité du MPS.
**N.B.** Les amplitudes relatives $\Delta P/P_{moy}$ observées sont très inférieures à celles du cas P230 proposé dans §12.2. Il faut néanmoins prendre en compte le fait que nous n'avons pas la même pression de fonctionnement et que la configuration LP10 ne présente pas de couplage entre du VSP et du VSO même si elle constitue une maquette réprésentative des phénomènes de couplage rencontrés dans le moteur P230. De plus, la présence des résidus n'est pas prise en compte.
Si les comportements similaires obtenus sur les trois configurations ne permettent pas, pour ces paramètres d'étude, de souligner l'influence de la combustion, ils offrent une validation de la méthode TSM-MF sur un cas de combustion d'une granulométrie continue et étendue. Les pressions moyennes en fond avant et en fond arrière pour le calcul GE sont retrouvées avec les simulations diphasiques avec des différences de l'ordre de 0.4%. De plus, les fréquences des instabilités sont les mêmes.
Finalement, nous souhaitons souligner les différences entre les simulations "ref" et "fast" qui sont assez importantes puisqu'on observe une diminution des amplitudes relatives des instabilités de plus de 10%. Les fréquences sont aussi changées car elles présentent des valeurs inférieures de l'ordre de 5%. Le couplage aéroacoustique ne s'établit donc pas de la même manière. Les pressions moyennes restent quant à elles assez stables avec des écarts inférieurs à 1% par rapport au cas GE "ref".
Ces écarts signifient que le couplage entre les deux phases n'est pas fidèlement modélisé lorsque le pas de temps est trop grand. Même s'il existe une erreur de splitting, celle-ci n'est probablement pas majoritaire pour deux raisons : 1- La zone de combustion distribution n'est pas modifiée entre les deux pas de temps. 2- Les écarts sur les niveaux d'ODP et les fréquences sont aussi observables pour le calcul GE. Ainsi, c'est plutôt la résolution de la phase gazeuse qui est prise en défaut ici. Le couplage aéroacoustique est un phénomène sensible qui peut ne pas être restitué précisément avec une intégration implicite et des valeurs $\mathrm{CFL}_g$ supérieures à 1. Ce point souligne l'importance du critère sur le pas de temps de simulation que nous nous étions fixé dans §7.1.1 i.e. un pas de temps proche ou inférieur au temps caractéristique de la phase gazeuse $\tau_g$. Pour nos applications, ce temps est le plus souvent contraint par l'acoustique de la chambre. Dans les études suivantes, nous nous fixons ce critère et dans la mesure du possible nous convenons de fixer le pas de temps de manière à obtenir une résolution explicite du gaz plus favorable aux études acoustiques. Pour la configuration LP10, nous poursuivons donc notre analyse avec le pas de temps $\Delta \mathrm{t}_{ref} = 2.10^{-7}$s.

### 12.3.3 Modifications sensibles des niveaux d'instabilités en fonction de la granulométrie

Dans cette dernière partie, nous réalisons une comparaison des niveaux d'ODP pour deux granulométries monodisperses avec la méthode MC. Précédemment, nous avons observé une légère augmentation des instabilités pour la distribution lognormale avec un mode centré sur $20\mu$m. Afin d'identifier clairement quelles tailles de gouttes impactent le couplage aéroacoustique, nous effectuons deux calculs avec des tailles initiales égales à $10\mu$m et $40\mu$m. Un facteur 2 sur la taille conduit à une dynamique suffisamment différente entre les granulométries monodisperses. Les temps caractéristiques des configurations $10\mu$m et $40\mu$m sont respectivement divisés et multipliés par 4 par rapport au calcul avec des gouttes de $20\mu$m. Notons que tous les autres paramètres numériques sont conservés et respectent la configuration décrite dans §12.3.1. Le pas de temps utilisé

**TABLE 12.5** – *Pour la granulométrie 20$\mu$m, comparaisons des amplitudes des instabilités et des pressions moyennes (les valeurs des pressions et des fréquences sont adimensionnées par rapport à celles du calcul GE "ref") pour les configurations données en Tab.(12.4) et les deux pas de temps*

| Calcul GE | $\Delta t = 2.10^{-7}$s | $\Delta t = 10^{-6}$s |
|---|---|---|
| $P_{moy}$ FAR | 100.00 | 99.98 |
| $P_{moy}$ FAV | 100.00 | 100.00 |
| $\Delta P/P_{moy}$ FAR | 0.86% | 0.74% |
| $\Delta P/P_{moy}$ FAV | 0.67% | 0.64% |
| Freq mode L1 | 100.0 | 95.9 |
| Freq mode L2 | 100.0 | 96.0 |

| Calcul MC | $\Delta t = 2.10^{-7}$s | $\Delta t = 10^{-6}$s |
|---|---|---|
| $P_{moy}$ FAR | 100.44 | 100.90 |
| $P_{moy}$ FAV | 100.48 | 100.92 |
| $\Delta P/P_{moy}$ FAR | 0.87% | 0.75% |
| $\Delta P/P_{moy}$ FAV | 0.69% | 0.63% |
| Freq mode L1 | 100.0 | 95.7 |
| Freq mode L2 | 100.0 | 95.0 |

| Calcul MF | $\Delta t = 2.10^{-7}$s | $\Delta t = 10^{-6}$s |
|---|---|---|
| $P_{moy}$ FAR | 100.40 | 100.86 |
| $P_{moy}$ FAV | 100.44 | 100.57 |
| $\Delta P/P_{moy}$ FAR | 0.87% | 0.75% |
| $\Delta P/P_{moy}$ FAV | 0.73% | 0.67% |
| Freq mode L1 | 100.0 | 95.7 |
| Freq mode L2 | 100.0 | 95.9 |

est $\Delta t_{ref} = 2.10^{-7}$s.
La discrétisation spatiale au sein de la zone de combustion des gouttes de 40$\mu$m ne pose aucun problème car elle est plus étendue que pour celle des gouttes de 20$\mu$m. Pour les gouttes de 10$\mu$m, on s'attend à obtenir une description moins précise des évolutions spatiales des différentes variables. Nous avons alors réalisé une simulation 1D complémentaire pour évaluer les conséquences d'une diminution de la taille. Comme illustré dans la Fig.(12.13), la zone de combustion est décrite avec 4 cellules ce qui ne semble pas optimal. Toutefois, en comparant l'étendue de la zone de combustion et le profil de température à ceux obtenues dans l'analyse 1D du §11.2.1 pour les gouttes de 5$\mu$m et 20$\mu$m, les résultats pour la granulométrie 10$\mu$m sont satisfaisants. Nous conservons donc le maillage LP10 pour l'étude de la granulométrie 10$\mu$m (à savoir $\Delta X$=100$\mu$m au dessus de la surface du propergol).
La comparaison entre le calcul GE et les trois configurations monodisperses est donnée en Tab.(12.6). On note que les pressions moyennes obtenues pour les calculs diphasiques sont proches du calcul GE sauf pour le cas des gouttes de 10$\mu$m. Aussi, les niveaux d'instabilités pour la configuration

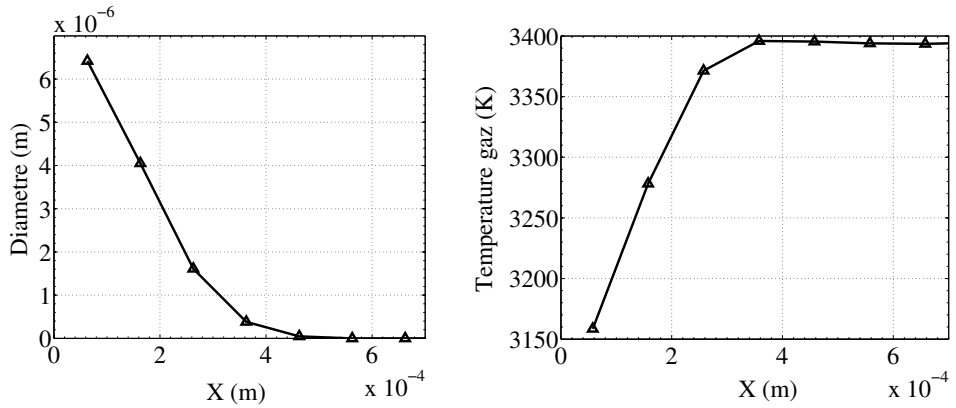


**FIGURE 12.13** – *Evolutions spatiales de la température du gaz (à droite) et du diamètre (à gauche) sur un maillage avec $\Delta X$=100$\mu$m. Calcul 1D de la combustion des gouttes de 10$\mu$m. Les symboles représentent les valeurs aux centres des cellules du maillage*

$10\mu$m sont toutefois les mêmes que pour la simulation diphasique $20\mu$m et l'approche GE. Les fréquences d'accrochage ne sont pas notablement modifiées pour ces trois calculs. La combustion des gouttes de $10\mu$m ne semble pas avoir d'impact majeur sur la dynamique des ODP comme cela est le cas avec les gouttes de $20\mu$m. Nous restons cependant prudent sur cette conclusion n'ayant pas expliqué les écarts sur les $P_{moy}$. Les résultats les plus remarquables concernent la simulation de la combustion des gouttes de $40\mu$m car on relève une élévation significative des $\Delta P/P_{moy}$ pour les capteurs FAR et FAV ; cette augmentation est de l'ordre de 60%. Les écarts avec les autres simulations portent également sur les fréquences des instabilités qui sont inférieures dans la configuration $20\mu$m. Ces résultats tendent à confirmer un effet de la taille des gouttes sur l'augmentation ou la diminution des niveaux d'instabilités. Les gouttes de taille suffisamment petite, brûlant très proche de la paroi, ne semblent pas contribuer au renforcement des instabilités aéroacoustiques. Cette analyse est approfondie dans le chapitre 13 où l'on réalise différents calculs avec et sans combustion des gouttes isolées pour la configuration P230.

**TABLE 12.6** – *Comparaisons des amplitudes des instabilités et des pressions moyennes (les valeurs des pressions et des fréquences sont adimensionnées par rapport à celles du calcul GE "ref") pour les trois granulométries monodisperses avec la méthode MC et le pas de temps* $\Delta t = 2.10^{-7}s$

| Simulations | GE "ref" | Mono $10\mu$m | Mono $20\mu$m | Mono $40\mu$m |
|---|---|---|---|---|
| $P_{moy}$ FAR | 100.00 | 101.78 | 100.90 | 100.22 |
| $P_{moy}$ FAV | 100.00 | 102.32 | 100.92 | 100.20 |
| $\Delta P/P_{moy}$ FAR | 0.86% | 0.86% | 0.87% | 1.38% |
| $\Delta P/P_{moy}$ FAV | 0.67% | 0.67% | 0.69% | 1.15% |
| Freq mode L1 | 100.0 | 100.1 | 100.0 | 98.9 |
| Freq mode L2 | 100.0 | 100.3 | 100.0 | 98.8 |

# Conclusion du chapitre 12

Ce chapitre constitue une validation des différents développements numériques implémentés dans le code CEDRE. Il présente également des premières conclusions sur l'influence des gouttes en combustion et des résidus sur les niveaux d'ODP.
Le schéma SRST pour l'intégration des termes sources de la méthode MF a été validé dans un contexte multidimensionnel. Les résultats obtenus pour les deux reconstructions de la méthode TSM-MF démontrent la pertinence de la construction affine par rapport à l'approche exponentielle. Rappelons que le gain de près de 50% sur le temps de calcul global observé sur la configuration TEU est remarquable car il n'est uniquement dû qu'au changement de reconstruction au sein des sections. Ce développement est une réelle avancée du point de vue de l'amélioration du ratio coût/précision de la méthode MF pour une utilisation dans un contexte industriel et montre le niveau de maturité atteint pour décrire la polydispersion en taille via une approche Euler-Euler.
Les niveaux d'instabilités obtenus sur la configuration P230 puis sur la configuration LP10 illustrent à la fois l'impact de la concentration en masse et celui de la granulométrie des gouttes. Pour le calcul P230, les écarts avec l'étude menée dans [Lupoglazoff et al., 2002] tendent à montrer une influence de la combustion des gouttes isolées et de leurs résidus sur le couplage entre VSP et VSO. Pour les calculs LP10 avec combustion complète des gouttes, il ressort un effet de seuil de la taille des gouttes sur les niveaux d'instabilités liés au VSP. En dessous d'une certaine taille, la combustion des gouttes n'a pas d'influence sur le couplage aéroacoustique. Dans le chapitre suivant, nous approfondissons l'étude de l'influence de la combustion des gouttes isolées et des agglomérats sur la configuration P230 avec le modèle de diffusion.

# Chapitre 13

# Calculs de démonstration P230 avec combustion des gouttes d'$Al/Al_2O_3$

*Dans ce chapitre final, nous proposons un ensemble de simulations sur une configuration P230. L'objectif est de mettre en avant une partie des développements numériques de cette thèse et de proposer ainsi une analyse plus fine de l'impact de la combustion distribuée sur les niveaux d'ODP. Dans la partie §12.2, nous avons proposé une étude de faisabilité numérique de la stratégie de splitting et de la méthode MF sur la base de la configuration P230 proposée dans [Lupoglazoff et al., 2002]. Ici, le maillage ainsi que la mise en données sont complètement revus. A partir de cette nouvelle configuration, nous soulignons les capacités du code CEDRE ainsi que les avancées notables réalisées dans le domaine des simulations diphasiques réactives appliquées aux MPS.*
*Nous étudions la granulométrie supposée de la Butalane du P230, sa combustion pilotée par le modèle de diffusion et une approche biespèce de la phase gazeuse. Le couplage entre le gaz, la phase condensée en combustion et les résidus, emploie la stratégie de splitting étudiée en détails dans cette thèse.*
*Ce chapitre se décompose en deux parties : La première décrit avec précision la configuration ainsi que le choix du maillage qui a été réalisé par N. Lupoglazoff (ONERA/DSNA) pour l'occasion. Nous définissons également les différents cas d'études consacrés à la détermination des facteurs clés conduisant à une modification des niveaux d'ODP. Nous analysons ainsi quelles tailles de gouttes jouent un rôle prépondérant sur le couplage aéroacoustique. Nous évaluons aussi l'influence du profil thermique au sein de la zone de combustion. Dans la seconde partie, nous réalisons une étude approfondie des simulations MPS au travers de trois cas d'études : 1- Une analyse de la zone de combustion 2- Une analyse plus globale de la structure de l'écoulement interne et 3- Une étude des niveaux et des fréquences des instabilités. Finalement, nous concluons sur les points clés de cette configuration industrielle et nous présentons les perspectives pour les futures simulations diphasiques réactives dans le contexte d'étude des ODP.*

## 13.1 Présentation des cas d'études et de la configuration numérique

La configuration numérique est basée sur un maillage 2D axisymétrique hybride de 279 200 cellules réalisé pour l'occasion (voir Fig.(13.1)). Ce dernier associe des cellules rectangles et des triangles ; la construction de ce maillage est détaillée dans la suite. Le domaine est partitionné en 128 sous-domaines répartis sur autant de processeurs. Les calculs sont initiés à partir d'un pré-calcul en gaz seul qui a permis l'amorçage de la tuyère et la montée en pression au sein de la chambre.
Les gouttes d'aluminium sont injectées depuis la surface du propergol avec une condition de type débit imposé. Nous reprenons les paramètres utilisés dans §11.1 pour le modèle de diffusion. La phase gazeuse est biespèce composée d'espèces globales nommées OX et PC. Rappelons aussi que le débit massique total de la phase dispersée représente 18% du débit total gaz plus gouttes. Ce débit correspond au chargement de la Butalane d'Ariane 5. La distribution bidisperse est constituée pour 12% du débit total des gouttes isolées de diamètre $d_1 = 30\mu$m et pour 6% des agglomérats de diamètre $d_2 = 120\mu$m. Les gouttes brûlent jusqu'à atteindre leurs tailles de résidus respectifs $d_{1,res} = 3\mu$m et $d_{2,res} = 60\mu$m.
Dans l'étude numérique 1D menée dans §11.1.1.1, nous avons évalué qu'un maillage présentant

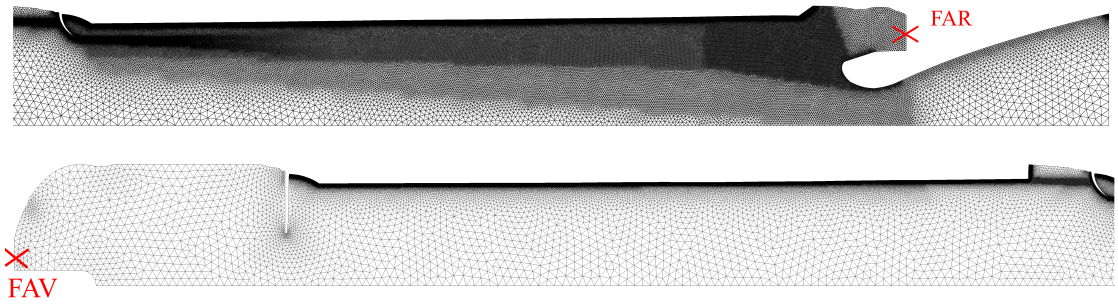


**FIGURE 13.1** – *Maillage hybride de la configuration P230 à t=87s. Zoom sur le segment S2 (en bas) et le segment S3 (en haut)*

des cellules de 750$\mu$m dans cette zone de combustion distribuée offrait une description appropriée des évolutions des différentes grandeurs. Nous avons donc choisi de reprendre ce critère géométrique pour construire le maillage. Comme illustré en Fig.(13.2), un maillage structuré-déformé est construit au dessus de la surface de combustion des deux chargements du P230. La taille de la première rangée de cellules est égale à 750$\mu$m. Une progression géométrique de la largeur de cellules est réalisée, la dernière rangée composant le maillage structuré présente une largeur d'environ 1500 $\mu$m. Le reste du domaine, c'est-à-dire le coeur de la chambre et la tuyère, utilise un maillage non structuré composé de triangles.
Les contraintes sur le maillage sont les suivantes : 1- Un raffinement plus important au niveau du segment S3 du moteur où se développe les structures tourbillonnaires du VSP mais aussi au niveau de la PTF et de son sillage où le VSO est généré. 2- Un compromis entre une discrétisation spatiale suffisamment raffinée pour décrire les petites structures hydrodynamiques et des tailles de cellules permettant de résoudre la phase gazeuse avec un pas de temps raisonnable. Ce maillage a été réalisé par Nicolas Lupoglazoff du département DSNA de l'ONERA sur la base de la géométrie du P230 fournie par HERAKLES. Ce nouveau maillage répond aux objectifs principaux des simulations diphasiques réactives pour les études d'instabilités en propulsion solide. Cela passe notamment par une restitution fidèle du couplage aéroacoustique de la chambre et une description fine des phénomènes dans la zone de combustion distribuée.

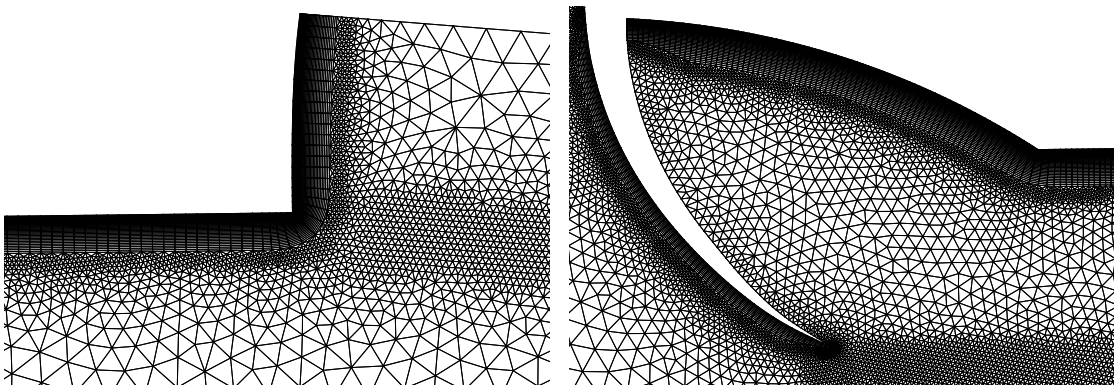

**FIGURE 13.2** – *Maillage hybride au niveau de la fin du segment S2 (à gauche) et de la PT (à droite)*

Synthétisées dans le Tab.(13.1), quatre simulations sont proposées :

– Un calcul GE monophasique : La combustion des gouttes isolées et des agglomérats est instantanée. Les résidus sont pris en compte sur la base d'une approche Gaz Equivalent. Les niveaux d'instabilités n'ont pour origine que le couplage aéroacoutique de l'écoulement interne.

– Un calcul Bidisperse : La combustion des gouttes isolées et des agglomérats est prise en compte. Les résidus issus de ces deux tailles de gouttes peuvent impacter l'écoulement. Les niveaux d'ODP sont donc potentiellement influencés par la combustion distribuée et par la présence des résidus inertes. Cependant, suite à une erreur commise lors du calcul des paramètres du modèle de combustion, la température du gaz à l'injection a été sous-évaluée. Les autres caractéristiques telles que les concentrations massiques injectées sont toutefois correctes. Cette température d'injection est égale à 1951K au lieu de 2245K. Nous avons décidé de poursuivre cette simulation

dans l'optique de mettre en lumière l'effet d'un gradient thermique plus important dans la zone de combustion.

– Un calcul Bidisperse2 : L'objectif de cette configuration est le même que le cas Bidisperse ; la correction sur la température d'injection de la phase gazeuse a été faite. La mise en données correspond à celle utilisée dans l'étude numérique 1D présentée dans §11.1.2.

– Un calcul Mono+Inerte : La combustion distribuée des agglomérats est prise en compte mais la combustion des gouttes isolées est supposée instantanée. Les deux classes de résidus sont suivies. Par comparaison avec les deux calculs bidisperses, ce calcul discrimine l'influence de la combustion des agglomérats de celle des gouttes isolées. La mise en données correspond à celle utilisée dans l'étude numérique 1D présentée dans §11.1.3.

La méthode MC est utilisée pour les trois calculs diphasiques comme pour les études 1D du chapitre 11.
Le temps de simulation est de 1,5s ce qui est suffisamment long pour réaliser une étude fréquentielle des instabilités ; une précision de 0,7Hz est pertinente pour cibler le premier mode acoustique se situant autour de 20Hz. Deux capteurs de pression sont disposés dans le domaine de calcul au niveau du fond arrière et au fond avant. Ils sont notés respectivement FAR et FAV comme cela est illustré dans la Fig.(13.1)
Nous avons mis en évidence, dans l'étude numérique LP10 du chapitre 12, l'importance de la résolution de la phase gazeuse et notamment de l'acoustique. Nous privilégions ainsi une résolution explicite. Le pas de temps utilisé ici est égal $5.10^{-7}$s. En effet, pour le maillage donné et les conditions de l'écoulement, le $\mathrm{CFL}_g$ maximal rencontré dans le domaine est égal à 0,3. Ce pas de temps est envisageable pour un calcul industriel. En outre, il permet de résoudre fidèlement les interactions entre phases car il est inférieur aux temps caractéristiques des plus petites gouttes, à savoir les résidus de $3\mu$m pour lesquels $\tau_{min} > 10^{-6}$s.
La stratégie de couplage est la méthode de splitting de Lie présentée dans §7.1.4.1. Une intégration temporelle explicite RK2 et une résolution d'ordre 2 en espace pour la phase gazeuse sont retenues. La convection de la phase liquide est intégrée explicitement avec un schéma RK2 et une méthode d'ordre 2 en espace. L'intégration des termes sources est assurée par un schéma explicite RK2-TVD.

**TABLE 13.1** – *Tableau récapitulatif des calculs P230 diphasiques réactifs avec le modèle de combustion de diffusion*

| Nom de l'étude | Détails | Objectifs |
|---|---|---|
| Bidisperse | Combustion gouttes isolées+agglomérats<br>Etude des petits et gros résidus<br>et température gaz moins élevée | Calcul complet<br>Gradient thermique + fort dans<br>la zone de combustion |
| Bidisperse2 | Combustion gouttes isolées+agglomérats<br>Etude des petits et gros résidus | Calcul complet |
| Mono+Inerte | Combustion agglomérats<br>Etude des petits et gros résidus<br>Combustion gouttes isolées instantanée | Influence<br>des agglomérats->résidus<br>et des petits résidus |
| GE | Combustion instantanée<br>Tous résidus->Gaz équivalent | Référence monophasique<br>Sans combustion distribuée<br>ni résidus |

## 13.2 Etude de l'écoulement diphasique réactif

### 13.2.1 Analyse de la zone de combustion distribuée

Nous vérifions, dans un premier temps, la dynamique de la combustion des gouttes isolées et des agglomérats sur le maillage hybride P230 en comparant les résultats de la configuration Bidisperse2 à ceux établis dans §11.1.2.

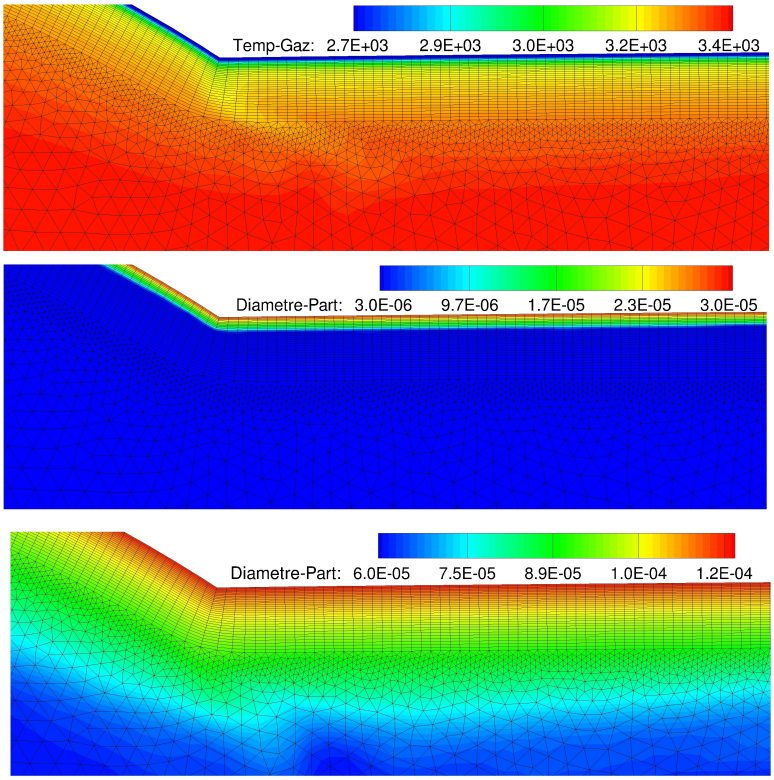


**FIGURE 13.3** – *Champs instantanés de la température du gaz (en haut) et des diamètres des gouttes isolées (au milieu) et des agglomérats (en bas) pour la configuration Bidisperse2. Visualisation de la zone de combustion au début du segment S3*

L'épaisseur de la zone de combustion est au moins dix fois plus étendue pour les agglomérats que pour les gouttes isolées (voir Fig.(13.3)) conformément au résultat obtenu sur la simulation 1D équivalente. Nous vérifions que la température de fin de combustion ainsi que le diamètre des résidus sont correctement atteints. Cette analyse est cependant plus complexe que dans les simulations 1D stationnaires. L'écoulement est ici instationnaire et les fluctuations dues aux structures hydrodynamiques rendent difficiles la lecture des grandeurs en fin de combustion.
Le maillage semble suffisamment raffiné dans la zone de combustion : on retrouve un minimum de 10 rangées de cellules pour décrire les échanges entre le gaz et les gouttes isolées. La zone de combustion des agglomérats s'étend finalement au delà du maillage rectangulaire. La transition avec le maillage non structuré ne présente aucune difficulté. Comme illustré dans la Fig.(13.4), l'évolution spatiale des agglomérats ne présente pas de discontinuités.
Nous comparons les dynamiques de combustion entre les approches monodisperse et bidisperse et les calculs réalisés dans §11.1.3. Une décorrélation entre la combustion des gouttes isolées et celle des agglomérats avait alors été observée. Ce mécanisme est retrouvé à l'échelle du moteur P230 comme en témoignent les Fig.(13.4)&(13.5). L'étendue de la zone de combustion est la même. De plus, le profil thermique associé à la zone de combustion des agglomérats est similaire pour les deux granulométries. La seule différence est un gradient thermique plus important près de la surface du propergol dû à la combustion des gouttes isolées. Il est intéressant d'analyser l'impact de ce gradient sur le développement des structures tourbillonnaires et les niveaux d'instabilités. Notons à nouveau que le maillage assure une description précise de l'évolution spatiale de la température du gaz depuis la surface du propergol.
Finalement, nous avons confirmé l'ensemble des observations faites dans le cadre des validations numériques 1D du chapitre 11. Nous avons validé le choix du maillage pour cette configuration moteur et la granulométrie retenue. Les évolutions des grandeurs thermodynamiques au sein de

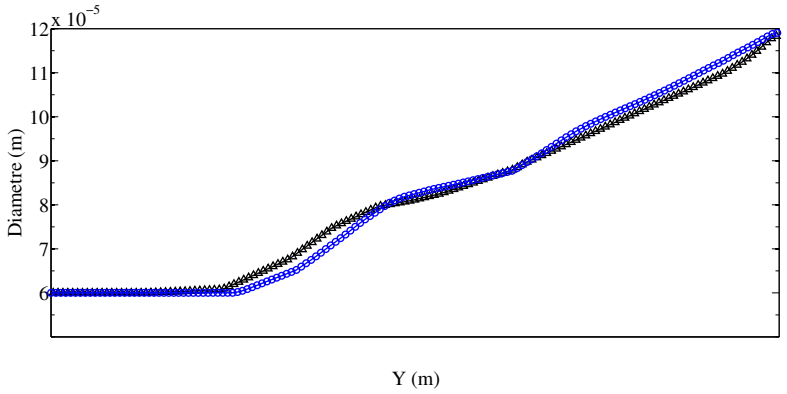


**FIGURE 13.4** – *Evolution spatiale du diamètre des agglomérats pour les configurations Mono+Inerte : – ∘ – et Bidisperse2 : –Δ–. Coupe dans la zone de combustion effectuée au milieu du segment S3*

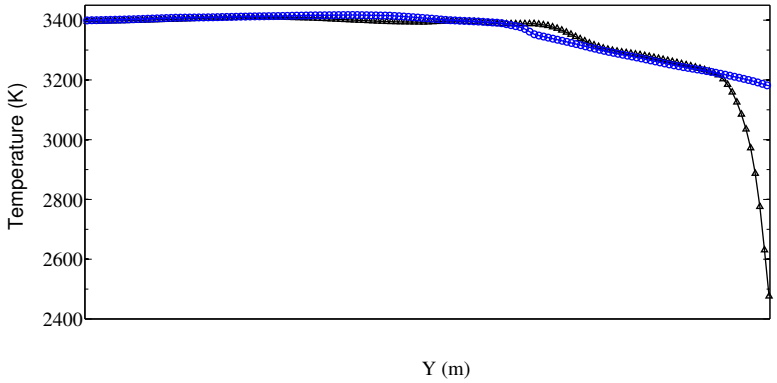


**FIGURE 13.5** – *Evolution spatiale de la température du gaz pour les configurations Mono+Inerte : – ∘ – et Bidisperse2 : –Δ–. Coupe dans la zone de combustion effectuée au milieu du segment S3*

la zone de combustion distribuée sont bien décrites ce qui garantit une bonne représentativité de l'interaction entre le gaz et la phase dispersée réactive.

### 13.2.2 Analyse de la structure de l'écoulement

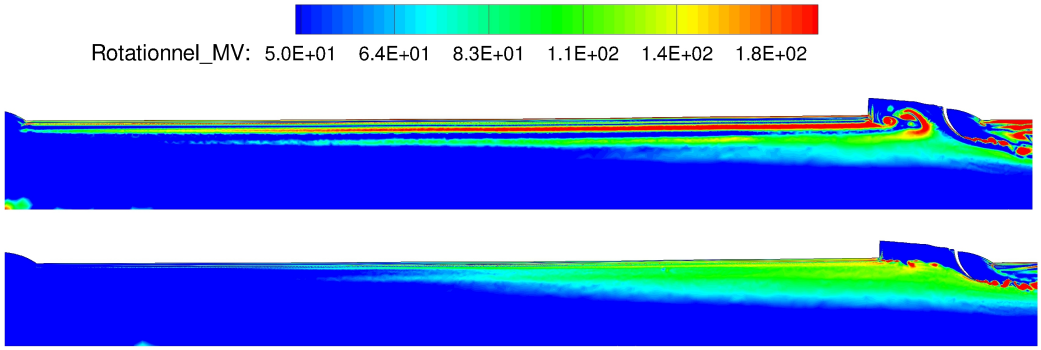


**FIGURE 13.6** – *Champs instantanés de la norme du rotationnel. Configurations Bidisperse2 (en haut) et GE (en bas). Zoom sur le segment S2 du P230*

Dans cette partie, nous étudions l'impact de la combustion distribuée et des résidus sur la structure globale de l'écoulement. Tout d'abord, le maillage hybride avec son raffinement assure une description plus fine des structures hydrodynamiques par rapport au maillage utilisé dans §12.2. Ce dernier est en effet plus grossier et filtre une grande partie des échelles spatiales. Par exemple, la norme du rotationnel présente des différences importantes en plusieurs régions de l'écoulement interne. Nous décomposons l'analyse en deux points :

– Dans un premier temps, nous observons dans la Fig.(13.6) la première partie de la chambre située au niveau du segment S2. Nous constatons une stratification de l'écoulement depuis la surface de combustion pour la configuration diphasique alors que celui-ci présente un caractère plus diffus pour le cas monophasique. La structure de l'écoulement au dessus de la surface du propergol est caractéristique du développement d'une couche limite acoustique. C'est un phénomène mis en évidence notamment pour des études sur l'ITHAC comme en témoigne la Fig.(2.19).

– Dans un second temps, nous constatons un comportement nettement modifié de l'évolution des grandes structures tourbillonnaires dans la partie arrière de la chambre comme présenté dans la Fig.(13.7). Les structures du VSP sont capturées dans les deux configurations. Ces structures s'associent également à celle générées par le VSO au niveau de la PTF. Dans le calcul diphasique, nous constatons toutefois une organisation de l'écoulement autour de plus grandes structures alors que le calcul GE présente des tourbillons de plus petites tailles ne s'appariant pas. Illustré en Fig.(C.1), une étude plus poussée du phénomène au niveau du sillage immédiat de la PTF montre que la combustion des gouttes entraine un couplage immédiat des structures hydrodynamiques du VSP et du VSO. Dans la mesure où cet appariement se produit sur une courte distance, les structures disposent de plus de temps pour se développer dans la partie avale de la chambre. L'écoulement diphasique favorise ainsi le couplage entre le VSO et le VSP ce qui laisse supposer que le couplage aéroacoustique est renforcé comme expliqué dans §1.2.3. On s'attend donc à obtenir des niveaux d'ODP plus important pour la simulation Bidisperse2. En Fig.(C.3), nous observons aussi des fluctuations plus marquées du champ de température. Les mêmes observations ont été faites pour l'ensemble des autres calculs diphasiques ce qui laisse également supposer une augmentation des instabilités.

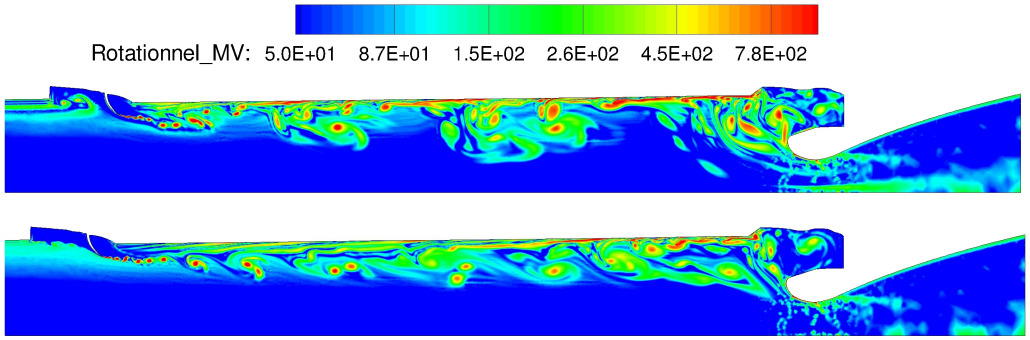


**FIGURE 13.7** – *Champs instantanés de la norme du rotationnel. Configurations bidisperse2 (en haut) et GE (en bas). Zoom sur le segment S3 du P230*

Nous souhaitons valider le modèle de diffusion ainsi que l'approche biespèce de la phase phase gazeuse. Le modèle est construit de manière à atteindre les diamètres des résidus quand toute l'espèce OX a été consommée. En Fig.(C.2), nous constatons qu'une partie de l'espèce OX n'a pas été totalement utilisée lors de la combustion et se retrouve convectée par l'écoulement puis éjectée par la tuyère. La valeur moyenne de fraction massique perdue est environ de 2% ce qui reste très faible sachant qu'elle est de 1 à l'injection (cas bidisperse). Il est intéressant d'observer que cette masse d'oxydants est arrachée à la zone de combustion distribuée via les structures tourbillonnaires. Elle se disperse de façon préférentielle au centre des structures hydrodynamiques. Dans un cas multi-dimensionnel, l'espèce OX n'est pas consommée si localement la taille des gouttes a déjà atteint celle du résidu. C'est une difficulté qui n'a pas été relevée lors des simulations 1D et prévue lors de la dérivation du modèle. En effet, ce dernier repose sur une diffusion locale des espèces autour des gouttes ce qui revient à une approche 0D. Dans le cas où l'écoulement présente une structure complexe menant à une non concordance spatiale de certaines tailles de gouttes avec l'espèce oxydante, il est possible que la combustion soit incomplète. C'est le cas dans le contexte d'une simulation moteur même si le phénomène reste ici marginal car finalement l'écoulement est assez régulier au sein de la zone de combustion. Il faut toutefois rester prudent pour des configurations où l'écoulement serait fortement perturbé.

En Fig.(C.4), les résidus d'alumine se répartissent différemment dans le moteur en fonction de leur

taille. Les plus petits, de diamètre $d_{1,res}$, tendent à suivre les fluctuations de la phase gazeuse plus rapidement que les résidus, de diamètre $d_{2,res}$, qui sont plus inertiels. Ces derniers se retrouvent d'ailleurs piégés dans le fond arrière du moteur car ils n'ont pas été entrainés par la phase gazeuse au niveau du convergent de la tuyère. La différence de dynamique entre les deux tailles de résidus est significative car pour un rapport $d_{2,res}/d_{1,res} = 20$, le temps de relaxation des plus gros résidus est plus de 400 fois supérieurs à celui des plus petits.
Comme illustré en Fig.(13.8), les champs instantanés des fractions volumiques des deux tailles de résidus soulignent des différences majeures sur leur position au sein de la chambre et des structures tourbillonnaires. Les résidus $d_{2,res}$ sont éjectés des tourbillons. Les échanges de quantité de mouvement et d'énergie entre les phases ont alors lieu dans des zones privilégiées de l'écoulement. L'hypothèse selon laquelle certaines tailles de gouttes renforcent les structures cohérentes alors que d'autres tendent à les dissiper est parfaitement illustrée. Dans le cas spécifique de la granulométrie bidisperse supposée de la Butalane du P230, nous constatons des répartitions spatiales complémentaires des résidus dans la chambre. De plus, en comparant les évolutions des champs de fractions volumiques des résidus au cours d'une période d'instabilités illustrées dans les Fig.(C.7)&(C.8), nous relevons que les deux tailles de résidus sont éjectées par la tuyère de manière alternative. Ainsi, les pertes d'impulsion spécifiques (cf. §1.1.4.3) ne sont pas les mêmes à différents instants car le couplage avec le gaz est changé selon la taille de gouttes et la concentration massique de la phase condensée passant par la tuyère. Cette observation est cependant à nuancer car dans la réalité la fragmentation des gouttes tend à changer la granulométrie de façon significative. La modélisation de ce phénomène justifie donc le travail mené sur les méthodes MF.

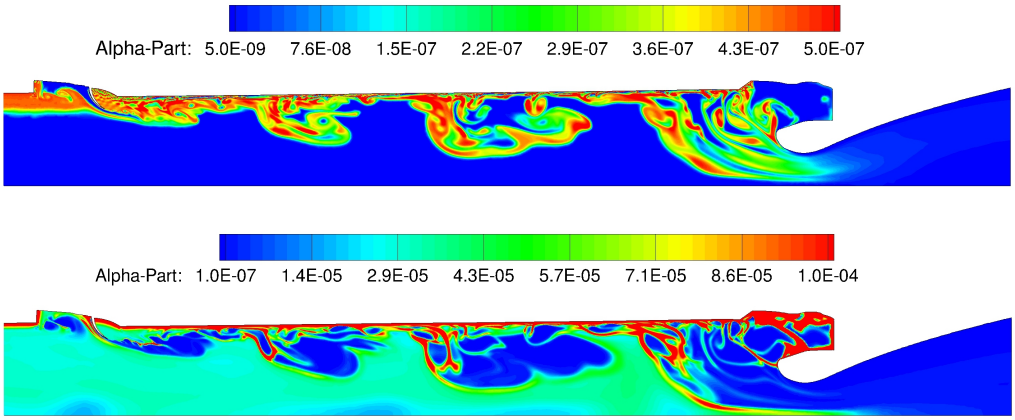


**FIGURE 13.8** – *Champs instantanés des fractions volumiques des gouttes isolées (en haut) et des agglomérats (en bas). Configuration Bidisperse2, zoom sur le segment S3 du P230*

Dans ce dernier point, nous nous intéressons aux différences entre les calculs Mono+Inerte et Bidisperse2. Lors de l'analyse de la zone de combustion, aucun changement significatif n'a été relevé sur la dynamique des agglomérats selon la prise en compte ou non de la combustion des gouttes isolées. Cette étude est ici étendue à une observation à l'échelle du moteur. Comme illustré en Fig.(C.5), la dispersion des résidus de $3\mu$m au sein des structures tourbillonnaires est la même pour les deux simulations avec et sans combustion instantanée. Nous remarquons cependant des différences sur le champ de fraction volumique dans le cas Bidisperse2. La Fig.(C.6), qui est un zoom au niveau du début du segment S3, souligne une structuration particulière de la répartition des résidus depuis la surface de combustion. Les échanges de masse et d'énergie entre les gouttes isolées et le gaz ont donc une influence sur l'organisation de l'écoulement proche de la surface du propergol. Dans ce cas précis, les fluctuations de vitesses conduisent à une stratification de la phase dispersée des plus petits résidus. La même étude a été faite pour les résidus issus de la combustion des agglomérats ; ce comportement n'a pas été retrouvé. Il s'agit donc de fluctuations très rapides, propres à une couche limite acoustique (cf. §2.2.2), auxquelles seuls les résidus de petite taille, caractérisés par des temps de réponse très courts, sont sensibles. Comme mis en évidence dans nos études d'acoustique linéaires, les gouttes présentant des nombre de Stokes particulièrement élevés ne subissent pas l'influence d'une perturbation acoustique. Il reste maintenant à déterminer si la combustion des gouttes isolées influence significativement l'écoulement. Soulignons toutefois que la fraction volumique est faible i.e. inférieure à $6.10^{-7}$ dans une grande partie de la chambre, son influence sur la phase gazeuse est donc mineure. Les résidus de $3\mu$m ne jouent pas un rôle important sur l'écoulement interne avec cette modélisation excluant les interactions gouttes-gouttes.

Par contre, la combustion des gouttes isolées impacte la dynamique de la phase gazeuse au sein de la zone de combustion. Cela est d'autant plus vrai que la concentration massique de la phase dispersée injectée est constituée aux 2/3 par les gouttes isolées ; elles contribuent majoritairement aux transferts de masse et d'énergie entre les phases.
Finalement, nous proposons dans la dernière partie de confirmer et d'affiner les observations faites sur l'écoulement interne au travers d'une étude fréquentielle et d'une estimation des niveaux d'instabilités.

### 13.2.3 Etude fréquentielle et des niveaux d'instabilités

Dans un premier temps, nous confirmons la validité de l'approche biespèce du gaz et du modèle de combustion en comparant les pressions moyennes des simulations diphasiques à celle obtenue pour le calcul GE, pris ici comme référence. La pression de fonctionnement recherchée est bien retrouvée avec des écarts inférieurs à 1%. Les pressions pour les trois calculs diphasiques sont remarquablement toutes inférieures à celle de l'approche GE. Ce résultat est caractéristique des pertes diphasiques d'impulsion spécifique au passage des résidus dans la tuyère. Cela n'a pas été relevé pour les calculs diphasiques de la configuration LP10 dans §12.3 car il n'y a pas de production de résidus.

**TABLE 13.2** – *Comparaisons sur les amplitudes relatives des instabilités et sur les pressions moyennes ainsi que les fréquences (valeurs adimensionnées par rapport au calcul GE) pour les différentes configurations données dans le Tab.(13.1)*

| Simulations | GE | Bidisperse | Bidisperse2 | Mono+Inerte |
|---|---|---|---|---|
| $P_{moy}$ FAR | 100.00 | 99.48 | 99.54 | 99.60 |
| $P_{moy}$ FAV | 100.00 | 99.48 | 99.54 | 99.59 |
| $\Delta P/P_{moy}$ FAR | 0.30% | 0.94% | 0.94% | 0.81% |
| $\Delta P/P_{moy}$ FAV | 0.32% | 0.88% | 0.93% | 0.75% |
| Freq mode L1 | 100.0 | 107.5 | 108.9 | 107.0 |

Puis, en Fig.(13.9), nous comparons les fréquences d'instabilités et nous relevons clairement l'absence de valeurs distinctes pour le calcul GE. Dans ce cas précis, le spectre est particulièrement bruité ce qui signifie que le couplage aéroacoustique n'est pas marqué. Nous avons, dans l'analyse de la structure de l'écoulement, observé l'absence de couplage entre les structures du VSO et celles du VSP. Le résultat se confirme avec l'analyse fréquentielle des calculs diphasiques. Nous avons supposé que l'appariement des deux sources hydrodynamiques témoignerait d'un couplage aéroacoustique plus important. Les spectres fréquentiels montrent effectivement des niveaux sensiblement plus élevés autour de la fréquence du premier mode acoustique, signe d'un accrochage préférentiel des instabilités sur ce mode à cet instant du tir.

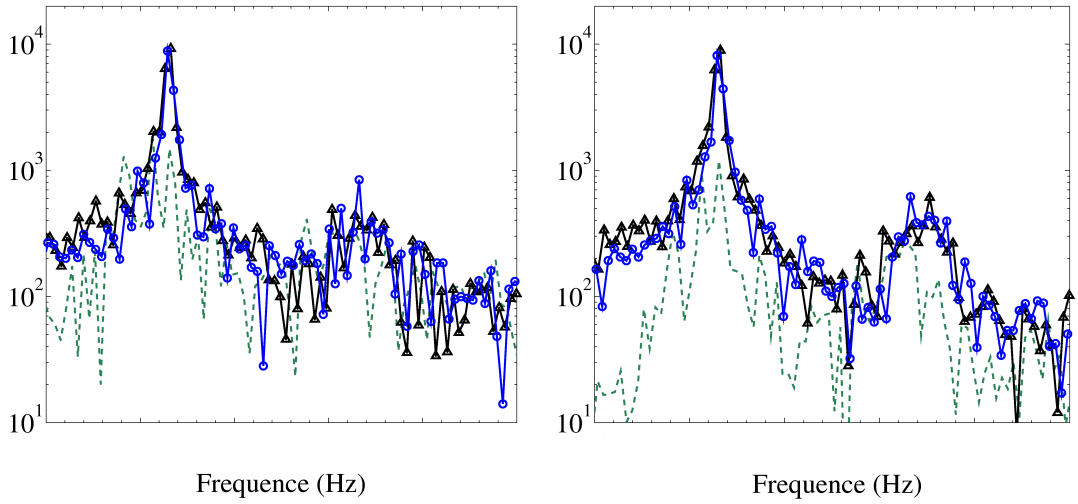


**FIGURE 13.9** – *Spectres fréquentiels des capteurs du fond arrière FAR (à gauche) et fond avant FAV (à droite). Résultats pour les configurations GE : – – –, Mono+Inerte : – ∘ – et Bidisperse2 : –Δ–*

Les amplitudes relatives $\Delta P/P_{moy}$ sont environ multipliées par 3 entre la simulation GE et les deux configurations bidisperses (voir Fig.(13.10)). Pour le calcul Mono+Inerte, une amplification

est également observée mais moins importante que pour la granulométrie bidisperse.
**N.B.** Les amplitudes relatives $\Delta P/P_{moy}$ observées sont inférieures à celles de l'autre configuration P230 étudiée dans §12.2. Il faut néanmoins garder à l'esprit que nous n'avons pas la même pression de fonctionnement et que nous n'étudions pas la même géométrie interne car l'instant simulé est différent.

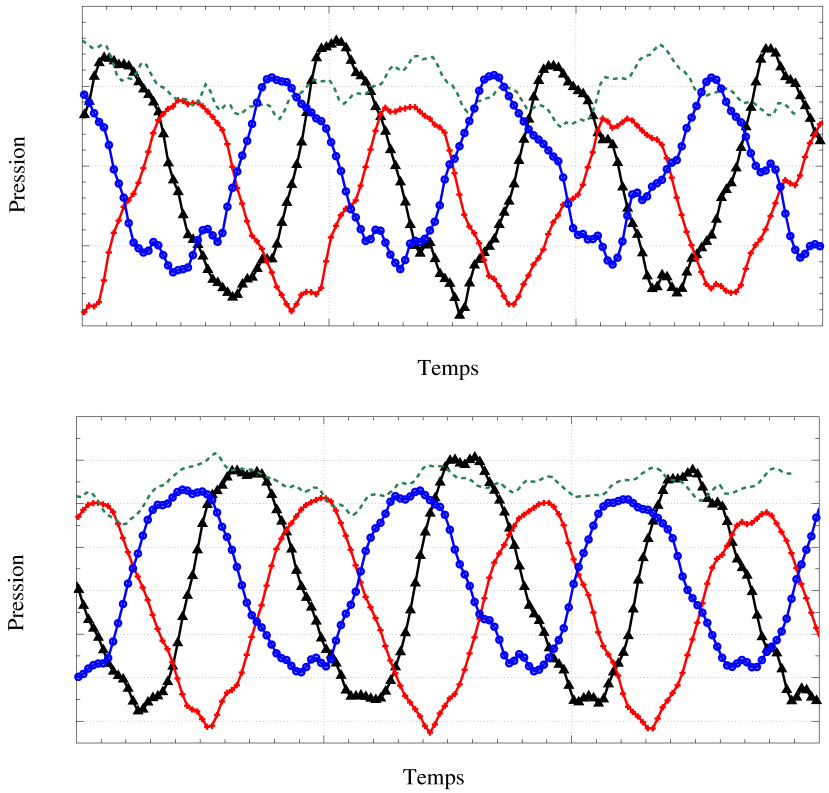


**FIGURE 13.10** – *Signaux de pression des capteurs au fond arrière FAR (en haut) et au fond avant FAV (en bas). Résultats pour les configurations GE : − − −, Mono+Inerte : − ∘ −, Bidisperse : − + − et Bidisperse2 : −Δ−*

Les résultats de ces simulations diphasiques sont significatifs et mettent en évidence le fait que la combustion distribuée et la dispersion des résidus peuvent jouer un rôle important dans les niveaux des ODP. L'amplification plus prononcée dans les cas bidisperses par rapport au cas où l'on considère une combustion instantanée des gouttes isolées tend à montrer que ces dernières influence positivement le couplage aéroacoustique. C'est cependant la contribution de la combustion des agglomérats qui semble être prépondérante.
Concernant l'importance du profil thermique au sein de la zone de combustion, la comparaison entre les deux calculs bidisperses ne montre aucun changement notable sur les niveaux. Le cas Bidisperse2 présente une amplitude relative plus importante pour le capteur FAV mais l'écart est très faible ce qui n'illustre pas une contribution majeure de l'évolution spatiale de la température du gaz. Cette conclusion doit être modérée car le gradient thermique présente le plus de différence dans la zone de combustion des gouttes isolées, une région du moteur qui ne semble pas impacter l'écoulement. Il est possible qu'un gradient thermique positionné plus loin de la surface du propergol ait une influence plus marquée. Si l'effet semble mineur sur un cas de VSP, il serait intéressant d'analyser cette différence sur un cas d'ITHAC.

## Conclusion du chapitre 13

Les simulations numériques proposées dans ce chapitre offrent un niveau avancé de représentativité de la combustion des gouttes d'aluminium avec le modèle de diffusion. L'analyse de la zone de combustion confirme les observations faites dans les chapitres 11 et 12. Au cours des simulations diphasiques LP10 présentées dans §12.3.3, nous avons également remarqué que seules les gouttes

de taille importante entrainaient une augmentation des niveaux. L'étude suivante confirme donc ce comportement. Nous posons ainsi comme hypothèse qu'il existe un effet progressif de l'amplification des ODP en fonction de l'étendue de la zone de combustion distribuée et de la région de l'écoulement où se produisent les échanges de masse et d'énergie. Il reste à savoir si, à partir d'une certaine épaisseur, cette dynamique est conservée ou si cela conduit à un comportement antagoniste mettant en évidence un effet de seuil. Finalement, la prise en compte de la polydispersion initiale est importante ; il ne faut pas oublier que ces calculs se basent sur une description discrète de la granulométrie supposée de la Butalane du P230 après agglomération et oxydation des gouttes à la surface du propergol. Dans la mesure où la distribution réelle est plus proche d'une représentation bimodale comme schématisée dans la Fig.(2.2.3.1), il est possible que l'étude d'une répartition plus étendue pour les agglomérats conduisent à des résultats différents mais toujours avec un rôle amplificateur. Dans ce contexte, la poursuite des développements consacrés à la description de la phase dispersée via la méthode MF est capital.

En perspectives, des simulations diphasiques réactives plus avancées sont envisageables avec une implémentation de la méthode MF bicomposant simplifiée, développée dans le cadre de cette thèse dans §6.4. Cela mènerait notamment à une description plus riche de la combustion des gouttes via le suivi du grossissement potentiel du lobe d'alumine dû à la rétrodiffusion d'oxydes d'aluminium. Les méthodes MF, particulièrement efficaces pour traiter des changements de tailles non locaux tels que la coalescence et la fragmentation, offriraient la possibilité de réaliser des calculs diphasiques MPS particulièrement représentatifs. En effet, les principaux phénomènes à l'origine des changements de taille seraient alors pris en compte. De plus, les travaux à venir dans le cadre de la thèse [Dupif, 2017] offrent de nouvelles perspectives pour les méthodes eulériennes, leur conférant la possibilité de modéliser les croisements de trajectoires de particules.

# Conclusion

L'objectif de ces travaux de thèse était l'amélioration de la modélisation de l'écoulement diphasique réactif dans les moteurs à propergol solide afin d'affiner, entre autres, la prévision des niveaux d'instabilités. La combustion distribuée des gouttes d'aluminium en proche paroi et la présence massive des résidus dans le reste du moteur peut en effet avoir un impact important sur la stabilité de fonctionnement du moteur via des mécanismes physiques complexes qui ont été présentés dans la partie I. Nos efforts ont porté essentiellement sur la modélisation et la simulation de la polydispersion en taille des sprays ainsi que sur celle des transferts de masse, de quantité de mouvement et d'énergie entre la phase gazeuse et cette phase condensée traitée comme une phase dispersée. Une attention particulière a été consacrée au développement de méthodes optimisées de résolution numérique des équations, à l'enrichissement des modèles de combustion à l'échelle de la goutte et à la description de la nature bicomposant des gouttes d'$Al/Al_2O_3$. Nous avons également pris soin de choisir une méthode apte à suivre à la fois la combustion des gouttes et la coalescence éventuelle des résidus.
Dans cette contribution, nous avons opté pour une résolution eulérienne de l'équation cinétique de Williams-Boltzmann et pour un choix de méthodes de moments assurant un suivi précis de la distribution en taille. Les méthodes Multi-Fluide répondent à ce critère grâce à un traitement de l'espace des tailles dans toute sa continuité. Elles sont particulièrement bien adaptées pour décrire avec précision la polydispersion des distributions régulières ainsi que l'évolution de la granulométrie engendrée par des phénomènes de coalescence et d'évaporation. Pour nos applications, nous avons justifié que l'approche MF à deux moments en taille est la méthode réalisable la plus pertinente car elle associe précision et flexibilité.
Nous avions également pour but de mettre en application les nouvelles méthodes et stratégies numériques introduites dans cette thèse au sein de la plateforme multi-physique CEDRE, et plus précisément au sein du solveur eulérien SPIREE qui traite la phase dispersée. Dans l'optique d'évaluer l'impact des gouttes sur l'écoulement et l'acoustique dans la chambre, nous avons cherché à restituer fidèlement le couplage entre phases dans le contexte d'une approche diphasique Euler-Euler. Cette problématique nous a conduit à développer une stratégie d'intégration temporelle performante afin de restituer au mieux les interactions gaz-gouttes. La mise en place d'une telle stratégie a donc impliqué une intervention à haut niveau dans la structure du code CEDRE afin de réaliser le couplage entre les solveurs SPIREE et CHARME.
Pour l'ensemble de ces avancées, nous nous sommes fixé le cahier des charges suivant : - proposer des développements numériques innovants et présentant un ratio coût/précision attractif pour des simulations industrielles - s'assurer de la facilité d'implémentation des méthodes et de leur modularité dans une logique de pérennisation du code CEDRE. La finalité était de réaliser des calculs instationnaires diphasiques réactifs sur des configurations moteur réalistes afin d'évaluer l'impact de la combustion et de la distribution en taille sur les niveaux d'ODP.
Les objectifs scientifiques majeurs de cette thèse et les réponses que nous avons apportées se résument de la manière suivante :

1. Nous cherchions à obtenir un meilleur ratio précision/coût pour la méthode Multi-Fluide à deux moments en taille. Dans le chapitre 5, nous avons mis au point une famille de fonctions de formes performante via une approche polynomiale. Le niveau de maturité atteint pour les méthodes TSM-MF est significatif ; les résultats obtenus dans le chapitre 12 sur des configurations moteur démontrent la pertinence d'une approche Euler-Euler pour décrire un écoulement diphasique polydisperse. Le nouveaux schémas numériques dédiés à l'intégration des termes sources réactifs diphasiques ont également permis d'une part de suivre l'évolution de la distribution en taille en respectant les conditions de réalisabilité sur les moments, et d'autre part de restituer avec précision les échanges entre phases.

2. Nous avons choisi une technique de splitting comme stratégie de couplage gaz-particules dans un contexte de "two-way coupling" et pour la résolution de systèmes présentant un

large spectre de temps caractéristiques. Cette méthode d'intégration temporelle s'est avérée robuste et précise en particulier pour des études numériques d'interactions diphasiques acoustique/spray évaporant. Elle a facilement été introduite dans le code CEDRE et a été évaluée sur des cas d'acoustique linéaire diphasique. Elle a enfin permis la réalisation de simulations diphasiques instationnaires sur configurations moteur.

3. Nous avons dérivé un modèle Multi-Fluide pour les gouttes à deux composants, nécessaire à l'emploi de modèles complexes de combustion des gouttes bicomposants. Nous avons également développé les schémas numériques associés à ce nouveau modèle pour le calcul des termes sources et des moments en masse. Nous l'avons implémenté et validé dans un code de recherches dédié à l'acoustique diphasique polydisperse. De plus, un modèle de combustion plus représentatif des échanges entre les gouttes et le milieu environnant multi-espèce a été proposé et évalué.
4. Des simulations de démonstration sur diverses configurations moteur, et plus particulièrement sur le P230, ont mis en évidence l'apport des différents développements pour l'étude de l'impact de la phase dispersée sur les niveaux d'instabilités. Nous avons observé un effet progressif de l'amplification des ODP en fonction de l'étendue de la zone de combustion distribuée. La combustion des agglomérats semble être prépondérante. La région de l'écoulement où se produit les échanges de masse, de quantité de mouvement et d'énergie joue donc un rôle capital. Le suivi précis de la distribution en taille des gouttes a contribué à améliorer cette réflexion. Le profil thermique et plus globalement la dynamique des échanges au sein de l'épaisseur de la zone de combustion ne semblent pas jouer un rôle majeur sur les niveaux d'ODP. Ce résultat reste néanmoins à confirmer pour des moteurs sujet à des instabilités d'origine thermoacoustique, ce type d'instabilités n'ayant pas été abordé dans ce travail. Les simulations réalisées sur la géométrie P230 ont en outre montré que les modèles et méthodes développés dans cette thèse pouvaient être mis en oeuvre sur des configurations industrielles pour des coûts raisonnables.

**Perspectives futures**

1. Dans cette contribution, nous avons entrepris une analyse de sensibilité des niveaux d'ODP en fonction de la granulométrie des gouttes en combustion à l'aide de simulations diphasiques réactives. Il serait particulièrement enrichissant de procéder à une étude plus approfondie de l'impact de la phase condensée en proposant des calculs combinant combustion des gouttes et coalescence des résidus. La méthode MF ainsi que les différents modèles physiques d'interactions gaz-gouttes et gouttes-gouttes sont implémentés et validés dans CEDRE. Des calculs complets tenant compte des différents phénomènes physiques liés aux changements de nature et de granulométrie de la phase condensée au sein du moteur sont donc envisageables. Il convient cependant de réaliser une phase de validation fonctionnelle puis une phase d'évaluation de ce type de calculs sur des cas tests avant une utilisation sur une configuration moteur.
2. La dérivation d'un modèle Multi-Fluide bicomposant et son implémentation dans un code de recherches a mis en évidence la faisabilité de l'approche et son intérêt pour décrire, avec un ratio coût/précision intéressant, l'évolution de la composition des gouttes ainsi que le suivi de la distribution en taille. Le formalisme MF confère à cette méthode l'avantage de traiter naturellement des processus d'évaporation et de coalescence. Cette méthode ouvre également la voie au développement de modèles de combustion plus avancés à l'échelle de la goutte en traitant naturellement les transferts de masse de chacun des composants. La méthode MF bicomposant apparaît donc comme un développement à fort potentiel pour une future implémentation dans le code CEDRE en vue d'études avancées sur l'impact de la combustion distribuée des gouttes d'aluminium sur les niveaux d'instabilités. En plus des récentes avancées sur les aspects réactifs et les interactions entre particules, l'implémentation du modèle bicomposant assurerait à SPIREE un niveau de développement équivalent à celui du solveur lagrangien SPARTE. Il serait intéressant, voire fondamental, de réaliser à cette occasion une étude comparative des deux approches en termes de précision et de coût calcul sur une configuration industrielle.

   A l'aide de ce nouveau modèle, il est envisageable d'aborder d'autres problématiques telles que la solidification des résidus d'alumine et les transitions de phase allotropique qui accompagnent le refroidissement des particules à la sortie du moteur. En effet, durant cette phase transitoire plusieurs variétés solides coexistent au sein de la particule. Il serait ainsi possible de suivre l'évolution de la phase condensée (évolutions de sa nature et de la granulométrie) depuis la surface du propergol jusqu'à la sortie du moteur et dans le jet. Ce modèle est également apte à décrire des particules qui comportent deux phases, une liquide et une solide.

Un tel développement dans CEDRE entrerait parfaitement dans le cadre du projet européen HAIC (acronyme pour High Altitude Ice Crystal) portant sur l'étude de l'accumulation de gouttes d'eau en surfusion sur les fuselages et les voilures d'avions.

3. Pour l'étude des instabilités d'origine thermoacoustique, la grande sensibilité du phénomène liée au couplage entre la couche limite acoustique et la phase dispersée nécessite de tenir compte avec une grande précision des échanges de masse, de quantité de mouvement et d'énergie entre les phases en adoptant des modèles consistants d'un point de vue thermodynamique. Des améliorations ont été apportées dans cette contribution via la prise en compte de la polydispersion en taille et la bicomposition de la goutte. L'enrichissement des modèles de combustion par une meilleure compréhension des phénomènes proche de la surface du propergol est toutefois essentiel. Cela passe par des travaux expérimentaux pour valider les lois de combustion, déterminer la distribution en taille des particules d'aluminium quittant la surface et leurs vitesses d'entraînement ainsi que pour juger des conditions d'un éventuel grossissement du lobe d'alumine. Finalement, des simulations DNS peuvent compléter ces observations en permettant d'établir des lois de parois diphasiques. La problématique des conditions aux limites, complexifiée par le suivi de la régression du propergol, est également un axe majeur de développement. Un effort est actuellement porté sur des simulations utilisant des méthodes de maillages mobiles.
4. La méthode TSM-MF est particulièrement performante pour suivre la polydispersion en taille du spray mais elle est toutefois limitée pour traiter convenablement des phénomènes de croisements de trajectoires de particules. La modélisation des phénomènes de PTC à petite échelle au niveau des structures tourbillonnaires/turbulentes ou encore des PTC à grande échelle au centre de la chambre et au niveau de la tuyère ne sont pas envisageables avec une fermeture monocinétique en vitesse. La problématique de la polydispersion en vitesse fait l'objet de travaux récents dans [Doisneau et al., 2012; Laurent et al., 2015; Dupif, 2017]. Ces nouvelles approches basées sur des fermetures Gaussiennes sont une avancée majeure pour l'amélioration du suivi de la dispersion des particules au sein du moteur ainsi que pour une meilleure modélisation des phénomènes de coalescence et de fragmentation. Elles constituent donc une étape de modélisation capitale pour aborder avec précision les interactions gaz-gouttes et gouttes-gouttes au sein du moteur. De plus, un travail conséquent doit être fourni afin que ces nouvelles méthodes numériques soient réalisables sur des maillages non structurés et performantes sur des architectures massivement parallèles.

   La prise en compte de la turbulence au sein de la phase gazeuse et son impact de la turbulence sur la dispersion des gouttes ainsi que sa modélisation reste un sujet de recherches particulièrement actif. Comme évoqué plus haut, l'étude des phénomènes PTC via l'emploi de fermetures en vitesse pertinentes est un axe d'amélioration. Pour les PTC à petite échelle, il est aussi nécessaire de tenir compte de modèles de sous-mailles dans le contexte des calculs en approche RANS et LES. Une amélioration des modèles diphasiques à phase dispersée via l'introduction de fermeture de corrélations turbulentes a été initiée dans [Sabat, 2015] et mérite d'être poursuivi.
5. La stratégie de splitting a démontré son efficacité pour améliorer la précision du couplage gaz-particules tout en offrant une maîtrise du coût calcul. Le potentiel de la méthode de séparation d'opérateurs n'est cependant pas totalement exploité ; deux améliorations sont envisageables :

   -D'une part, l'emploi d'un pas de temps adaptatif local au niveau des opérateurs de transport offrirait un gain de temps significatif. En effet, pour des calculs instationnaires que l'on souhaite résoudre explicitement, il est particulièrement intéressant de moduler la valeur du pas de temps pour répondre aux critères de stabilité du schéma en fonction des conditions locales de l'écoulement et de la finesse du maillage. Pour des simulations MPS, la mise en place d'une telle fonctionnalité est justifiée car le pas de temps global est bien souvent contraint pour satisfaire des conditions dans les zones très raffinées en proche paroi ou bien dans la zone d'écoulement supersonique dans le divergent de la tuyère.

   -D'autre part, l'intensité algorithmique associée aux approches diphasiques des systèmes Euler-Euler telle que le calcul des moments en taille et des termes sources nécessite une répartition optimale de la charge machine. Pour des calculs très massivement parallèles, l'idée d'une programmation hybride mêlant protocole MPI pour le découpage en sous-domaines et parallélisation Open-MP pour la répartition de la charge sur chaque noeud de calcul apparaît comme un développement majeur à réaliser dans le code CEDRE. Une évaluation de l'efficacité de la programmation hybride pour la résolution des systèmes diphasiques fortement couplés est en cours [Dupif et al., 2015a; Dupif, 2017].

6. Un travail particulièrement innovant est la poursuite des efforts de modélisation et d'analyse des phénomènes d'atomisation primaire, et donc du couplage entre un modèle d'écoulement à phases séparées et un modèle décrivant une phase dispersée. Nous rappelons, qu'à ce jour, la résolution complète et précise du phénomène d'atomisation au sein d'une même simulation est un défi. Les calculs couplés proposés dans le chapitre 10 pour des applications de propulsion liquide ouvrent la voie à de nouveaux développements. Nous pensons notamment aux améliorations du modèle pour la description de l'écoulement à phases séparées comme précisé dans [Le Touze, 2015] avec l'approche à 7 équations incluant une modélisation fine des termes de relaxation en pression, en vitesse et en température entre phases. L'ajout d'une équation d'évolution de la densité d'aire interfaciale permettrait une meilleure modélisation du phénomène d'atomisation primaire pour la détermination des propriétés des gouttes créées. La modélisation de la turbulence semble également primordiale pour évaluer les conditions d'atomisation primaire au niveau de l'interface.

# Annexe A

# Calculs intra-sectionnels des termes sources d'échanges avec le gaz

## A.1 Cas des particules inertes

### A.1.1 Calcul de la force de traînée

#### A.1.1.1 Régime de stokes

L'expression de la force de traînée pour une particule d'une surface donnée $S$ est :

$$\mathbf{F}_p(S) = 3\pi^{1/2}\mu_g(\mathbf{u_g} - \mathbf{u})S^{1/2} \tag{A.1}$$

On obtient alors, comme toutes les gouttes de la section $k$ possèdent la même vitesse :

$$\mathbf{F}^{(\mathbf{k})}_{\mathbf{Stokes}} \quad = 3\pi^{1/2}\mu_g(\mathbf{u_g} - \mathbf{u}^{(\mathbf{k})})\mathrm{I}_{1/2} \tag{A.2}$$

#### A.1.1.2 Régime de Schiller-Naumann

L'expression de la force de traînée pour $Re_p \leq 1000$ est :

$$\mathbf{F_p}(S) = 3\pi^{1/2}\mu_g(\mathbf{u_g}-\mathbf{u}^{(\mathbf{k})})S^{1/2}+0{,}45\,\pi^{0{,}1565}\,\left(\rho_g\|\mathbf{u_g} - \mathbf{u}^{(\mathbf{k})}\|\right)^{0{,}687}\,(\mathbf{u_g}-\mathbf{u}^{(\mathbf{k})})\mu_g^{0{,}313}\,S^{0.8435} \tag{A.3}$$

Nous obtenons pour la section $k$ :

$$\mathbf{F}^{(\mathbf{k})} = \mathbf{F}^{(\mathbf{k})}_{\mathbf{Stokes}} + 0{,}45\,\pi^{0{,}1565}\,\left(\rho_g\|\mathbf{u_g} - \mathbf{u}^{(\mathbf{k})}\|\right)^{0{,}687}\,(\mathbf{u_g} - \mathbf{u}^{(\mathbf{k})})\mu_g^{0{,}313}\,\mathrm{I}_{0{,}8435} \tag{A.4}$$

L'expression de la force de traînée pour $Re_p > 1000$ est :

$$\mathbf{F_p}(S) = 0{,}055625\,\rho_g\,\|\mathbf{u_g} - \mathbf{u}\|(\mathbf{u_g} - \mathbf{u})\,S \tag{A.5}$$

Nous obtenons pour la section $k$ :

$$\mathbf{F}^{(\mathbf{k})} \quad = 3\pi^{1/2}\mu_g(\mathbf{u_g} - \mathbf{u}^{(\mathbf{k})})\mathrm{I}_1 \tag{A.6}$$

### A.1.2 Echange de chaleur

#### A.1.2.1 Régime de stokes

En régime de Stokes, nous avons $Nu_c = 2$, le terme d'échange de chaleur vaut donc :

$$\mathrm{H}^{(k)}_{Stokes} = 2\,\pi^{1/2}\,\lambda_g\,\left(T_g - T^{(k)}\right)\mathrm{I}_{1/2} \tag{A.7}$$

#### A.1.2.2 Régime de Schiller-Naumann

Pour le régime de Ranz-Marshall où $Nu_c = 2 + 0{,}6\,Re_p^{1/2}\,\mathrm{Pr}^{1/3}$, il est possible d'écrire le terme correctif $Nu_c$ en fonction de la variable surface tel que :

$$Nu_c = 2 + 0{,}6\,\mathrm{Pr}^{1/3}\,\frac{\rho_g^{1/2}\,\|\mathbf{u_g} - \mathbf{u}^{(\mathbf{k})}\|^{1/2}}{\mu_g^{1/2}\,\pi^{1/4}}\,S^{1/4} \tag{A.8}$$

$$\mathrm{H}_{RM}^{(k)} = \mathrm{H}_{Stokes}^{(k)} + 0{,}6\,\pi^{1/4}\,\mathrm{Pr}^{1/3}\,\frac{\rho_g^{1/2}\,\|\mathbf{u_g}-\mathbf{u^{(k)}}\|^{1/2}}{\mu_g^{1/2}}\,\lambda_g\,\left(T_g - T^{(k)}\right)\,\mathrm{I}_{3/4} \tag{A.9}$$

## A.2 Cas des particules réactives

### A.2.1 Evaporation contrôlée par la conductivité thermique

Dans une première approche pour la méthode sectionnelle, nous souhaitons obtenir le débit moyen évaporé pour une section $k$. L'intégration faite sur la variable taille S permet d'obtenir alors le débit massique de l'ensemble des gouttes de la section considérée :

$$\dot{m}^{(k)} = \pi^{1/2}\,\frac{\lambda_g}{c_{p,g}}\,\ln(1+B_T)\int_{S_{k-1}}^{S_k} Nu_c(S)\,S^{1/2}\,n(S)\mathrm{d}S \tag{A.10}$$

**Expression du taux d'évolution de la surface des gouttes**
Précédemment des débits moyens ont été calculés par section. Suivant le même principe des taux d'évaporation moyens, appelés $K$, peuvent être obtenus pour chacune des sections. Nous avons une relation entre le débit massique et le taux d'évolution de la surface :

$$\dot{m}_p = -\mathrm{d}_t\left(\frac{\rho_l}{6\pi^{1/2}}S^{3/2}\right) = -\frac{\rho_l}{4\pi^{1/2}}S^{1/2}\,\mathrm{d}_t S = \frac{\rho_l}{4\pi^{1/2}}S^{1/2}\,K, \qquad K = -\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t} \tag{A.11}$$

où $\rho_l$ est la masse volumique de la phase liquide, supposée ici constante.

**Corrélation de Stokes**

**Calcul du débit massique sectionnel**
En régime de Stokes, nous avons $Nu_c = 2$, le débit massique de la section $k$ vaut :

$$\dot{m}_{Stokes}^{(k)} = 2\,\pi^{1/2}\,\frac{\lambda_g}{c_{p,g}}\,\ln(1+B_T)\int_{S_{k-1}}^{S_k} S^{1/2}\,n(S)\mathrm{d}S = 2\,\pi^{1/2}\,\frac{\lambda_g}{c_{p,g}}\,\ln(1+B_T)\,\mathrm{I}_{1/2} \tag{A.12}$$

**Calcul du taux d'évolution surfacique sectionnel**
Nous avons l'égalité suivante :

$$\dot{m}_p = \frac{\rho_l}{4\pi^{1/2}}\,S^{1/2}\,K = 2\,\pi^{1/2}\frac{\lambda_g}{c_{p,g}}\,\ln(1+B_T)\,S^{1/2} \tag{A.13}$$

Le taux d'évolution de la surface est indépendant de S pour le régime de Stokes :

$$K^{(k)} = K = \frac{8\pi\lambda_g}{\rho_l\,c_{p,g}}\,\ln(1+B_T) \tag{A.14}$$

**Corrélation de Ranz-Marshall**

**Calcul du débit massique sectionnel**
Pour le régime de Ranz-Marshall, il est possible d'écrire le terme correctif $Nu_c$ en fonction de la variable surface tel que :

$$Nu_c = 2 + 0{,}6\,\mathrm{Pr}^{1/3}\,\frac{\rho_g^{1/2}\,\|\mathbf{u_g}-\mathbf{u^{(k)}}\|^{1/2}}{\mu_g^{1/2}\,\pi^{1/4}}\,S^{1/4} \tag{A.15}$$

On trouve alors :

$$\begin{aligned}\dot{m}_{RM}^{(k)} &= \int_{S_{k-1}}^{S_k} \left( \pi^{1/2} \frac{\lambda_g}{c_{p,g}} \ln(1+B_T)\, S^{1/2}\, n(S) \left[ 2 + 0{,}6\, \mathrm{Pr}^{1/3}\, \frac{\rho_g^{1/2}\, \|\mathbf{u_g} - \mathbf{u^{(k)}}\|^{1/2}}{\mu_g^{1/2}\, \pi^{1/4}}\, S^{1/4} \right] \right) \mathrm{d}S \\ &= \dot{m}_{Stokes}^{(k)} + 0{,}6\, \mathrm{Pr}^{1/3}\, \pi^{1/4}\, \frac{\rho_g^{1/2}\, \|\mathbf{u_g} - \mathbf{u^{(k)}}\|^{1/2}}{\mu_g^{1/2}}\, \frac{\lambda_g}{c_{p,g}} \ln(1+B_T) \int_{S_{k-1}}^{S_k} S^{3/4}\, n(S) \mathrm{d}S \\ &= \dot{m}_{Stokes}^{(k)} + 0{,}6\, \mathrm{Pr}^{1/3}\, \pi^{1/4}\, \frac{\rho_g^{1/2}\, \|\mathbf{u_g} - \mathbf{u^{(k)}}\|^{1/2}}{\mu_g^{1/2}}\, \frac{\lambda_g}{c_{p,g}} \ln(1+B_T)\, \mathrm{I}_{3/4}\end{aligned} \tag{A.16}$$

Le calcul du débit massique pourra se présenter sous la forme suivante :

$$\dot{m}_{RM}^{(k)} = \frac{\lambda_g}{c_{p,g}} \ln(1+B_T) \left( 2\,\pi \mathrm{I}_1 + 0{,}6\, \mathrm{Pr}^{1/3}\, \pi^{1/4}\, \frac{\rho_g^{1/2}\, \|\mathbf{u_g} - \mathbf{u^{(k)}}\|^{1/2}}{\mu_g^{1/2}}\, \mathrm{I}_{3/4} \right) \tag{A.17}$$

**Calcul du taux d'évolution surfacique sectionnel**
Nous avons la relation suivante :

$$\begin{aligned}\dot{m}_p(S) &= \frac{\rho_l}{4\pi^{1/2}} S^{1/2} K(S) \\ &= \pi^{1/2}\, \frac{\lambda_g}{c_{p,g}} \ln(1+B_T) S^{1/2} \left( 2 + 0{,}6\, \mathrm{Pr}^{1/3}\, \frac{\rho_g^{1/2}\, \|\mathbf{u_g} - \mathbf{u^{(k)}}\|^{1/2}}{\mu_g^{1/2}\, \pi^{1/4}}\, S^{1/4} \right)\end{aligned} \tag{A.18}$$

Le taux d'évolution surfacique se calcule de la manière suivante :

$$\begin{aligned}K(S) &= 4\pi\, \frac{\lambda_g}{\rho_l\, c_{p,g}} \ln(1+B_T) \left( 2 + 0{,}6\, \mathrm{Pr}^{1/3}\, \frac{\rho_g^{1/2}\, \|\mathbf{u_g} - \mathbf{u^{(k)}}\|^{1/2}}{\mu_g^{1/2}\, \pi^{1/4}}\, S^{1/4} \right) \\ &= 8\pi\, \frac{\lambda_g}{\rho_l\, c_{p,g}} \ln(1+B_T) \\ &\quad + 0{,}6\, \mathrm{Pr}^{1/3}\, \pi^{3/4}\, \tfrac{\lambda_g}{\rho_l\, c_{p,g}} \ln(1+B_T) \frac{\rho_g^{1/2}\, \|\mathbf{u_g} - \mathbf{u^{(k)}}\|^{1/2}}{\mu_g^{1/2}}\, S^{1/4} \\ &= K_{Stokes} \;+\; 0{,}6\, \mathrm{Pr}^{1/3}\, \pi^{3/4}\, \tfrac{\lambda_g}{\rho_l\, c_{p,g}} \ln(1+B_T) \frac{\rho_g^{1/2}\, \|\mathbf{u_g} - \mathbf{u^{(k)}}\|^{1/2}}{\mu_g^{1/2}}\, S^{1/4}\end{aligned} \tag{A.19}$$

Le taux d'évolution d'une goutte appartenant à la section $k$ est obtenu en moyennant par le nombre de particules $N^{(k)}$ de la section le taux d'évolution intégré sur la section :

$$K^{(k)} = \frac{\displaystyle\int_{S_{k-1}}^{S_k} K(S)\, n(S) \mathrm{d}S}{\displaystyle\int_{S_{k-1}}^{S_k} n(S) \mathrm{d}S} = \frac{\displaystyle\int_{S_{k-1}}^{S_k} K(S)\, n(S) \mathrm{d}S}{N^{(k)}} \tag{A.20}$$

On a alors :

$$\begin{aligned}K^{(k)} &= 8\pi\, \frac{\lambda_g}{\rho_l\, c_{p,g}} \ln(1+B_T) \\ &\quad + 0{,}6\, \mathrm{Pr}^{1/3}\, \pi^{3/4}\, \frac{\lambda_g}{\rho_l\, c_{p,g}} \ln(1+B_T) \frac{\rho_g^{1/2}\, \|\mathbf{u_g} - \mathbf{u^{(k)}}\|^{1/2}}{\mu_g^{1/2}}\, \frac{1}{N^{(k)}} \int_{S_{k-1}}^{S_k} S^{1/4} n(S) \mathrm{d}S \\ &= K_{Stokes} \;+\; 0{,}6\, \mathrm{Pr}^{1/3}\, \pi^{3/4}\, \frac{\lambda_g}{\rho_l\, c_{p,g}} \ln(1+B_T) \frac{\rho_g^{1/2}\, \|\mathbf{u_g} - \mathbf{u^{(k)}}\|^{1/2}}{\mu_g^{1/2}}\, \frac{1}{N^{(k)}} \mathrm{I}_{1/4}\end{aligned} \tag{A.21}$$

### A.2.2 Evaporation contrôlée par la diffusion des espèces

Dans une première approche pour la méthode sectionnelle, nous souhaitons obtenir le débit moyen évaporé pour une section $k$. L'intégration est faite sur les différents termes qui dépendent de la variable taille. Nous obtenons alors le débit massique de l'ensemble des gouttes de la section considérée :

$$\dot{m}^{(k)} = \pi^{1/2} \mathrm{D_A} \ln(1+B_M) \int_{S_{k-1}}^{S_k} Sh_c^*(S)\, S^{1/2}\, n(S) \mathrm{d}S \tag{A.22}$$

**Expression du taux d'évolution de la surface des gouttes**
Nous avons écrit auparavant :

$$\dot{m}_p(S) = \frac{\rho_l}{4\pi^{1/2}} S^{1/2} K(S) \tag{A.23}$$

Finalement, le taux d'évolution de la surface d'une goutte peut s'exprimer tel que :

$$K(S) = \frac{4\pi^{1/2}}{\rho_l\, S^{1/2}} \dot{m}_p(S) = \frac{4\pi^{1/2}}{\rho_l\, S^{1/2}} \pi^{1/2} \mathrm{D_A} \ln(1+B_M) Sh_c^*(S) S^{1/2} \tag{A.24}$$

$$K(S) = \frac{4\pi}{\rho_l} \mathrm{D_A}\ \ln(1+B_M)\, Sh_c^*(S) \tag{A.25}$$

**Expression du terme d'échange de chaleur**
Quand la température de la goutte a atteint sa température de saturation $T_{sat}$, le terme d'échange de chaleur est nul $\mathrm{H_p} = 0$.
Quand la température de la goutte est inférieure à sa température de saturation $T_{sat}$, il n'y a pas d'échange de masse $\dot{m}_p = 0$, le terme d'échange de chaleur est non nul et son expression est égale à :

$$\mathrm{H_p} = \dot{m}_p\, c_{p,A}\ (T_g - T) \left( \frac{1}{B_T} - L_v \right) \tag{A.26}$$

où $c_{p,A}$ est la capacité calorifique massique de l'espèce évaporante.
Avec la méthode sectionnelle, nous obtenons tout de suite :

$$\mathrm{H}^{(k)} = \dot{m}^{(k)}\, c_{p,A}\ \left( T_g - T^{(k)} \right) \left( \frac{1}{B_T} - L_v \right) \tag{A.27}$$

**Corrélation de Stokes**

**Calcul du débit massique sectionnel**
En régime de Stokes, nous avons $Sh_c = 2$ et $Sh_c^* = 2$, le débit massique de la section k moyenné sur la section est :

$$\begin{aligned} \dot{m}^{(k)}_{Stokes} &= 2\,\pi^{1/2}\,\mathrm{D_A}\ \ln(1+B_M) \int_{S_{k-1}}^{S_k} S^{1/2} n(S) \mathrm{d}S \\ &= 2\,\pi^{1/2}\,\mathrm{D_A}\ \ln(1+B_M)\, \mathrm{I}_{1/2} \end{aligned} \tag{A.28}$$

**Calcul du taux d'évolution surfacique sectionnel**
En régime de Stokes, le taux d'évolution surfacique est obtenu immédiatement car constant sur chaque section :

$$K^{(k)}_{Stokes} = \frac{8\pi}{\rho_l} \mathrm{D_A} \ln(1+B_M) \tag{A.29}$$

**Corrélation de Ranz-Marshall**
Donnons tout d'abord l'expression du Sherwood modifié par l'effet de film :

$$Sh_c^* = 2 + \frac{2 + 0{,}6\, Re_p^{1/2}\, S_{cA}^{1/3} - 2}{\mathrm{F_M}(B_M)} = 2 + \frac{0{,}6\, \rho_g^{1/2}\, \|\mathbf{u_g} - \mathbf{u}\|^{1/2}\, S_{cA}^{1/3}}{\mu_g^{1/2} \mathrm{F_M}(B_M)} \frac{S^{1/4}}{\pi^{1/4}} \tag{A.30}$$

**Calcul du débit massique sectionnel**
On trouve alors :

$$\begin{aligned}
\dot{m}_{RM}^{(k)} &= \int_{S_{k-1}}^{S_k} \left( \pi^{1/2} \mathrm{D_A} \ln(1+B_M) S^{1/2} n(S) \left[ 2 + \frac{0{,}6\, \rho_g^{1/2}\, \|\mathbf{u_g} - \mathbf{u^{(k)}}\|^{1/2}\, S_{cA}^{1/3}}{\mu_g^{1/2} \mathrm{F_M}(B_M)} \frac{S^{1/4}}{\pi^{1/4}} \right] \right) \mathrm{d}S \\
&= \dot{m}_{Stokes}^{(k)} + \frac{0{,}6\, \rho_g^{1/2}\, \|\mathbf{u_g} - \mathbf{u^{(k)}}\|^{1/2}\, S_{cA}^{1/3}}{\mu_g^{1/2} \mathrm{F_M}(B_M)} \mathrm{D_A} \ln(1+B_M)\, \pi^{1/4} \int_{S_{k-1}}^{S_k} S^{3/4}\, n(S) \mathrm{d}S \\
&= \dot{m}_{Stokes}^{(k)} + \frac{0{,}6\, \rho_g^{1/2}\, \|\mathbf{u_g} - \mathbf{u^{(k)}}\|^{1/2}\, S_{cA}^{1/3}}{\mu_g^{1/2} \mathrm{F_M}(B_M)} \mathrm{D_A} \ln(1+B_M)\, \pi^{1/4}\, \mathrm{I}_{3/4}
\end{aligned} \tag{A.31}$$

**Calcul du taux d'évolution surfacique sectionnel**
Nous avions établi la relation suivante :

$$K(S) = \frac{4\pi}{\rho_l} \mathrm{D_A} \ln(1+B_M) Sh_c^*(S) \tag{A.32}$$

Pour la corrélation de Ranz-Marshall, elle devient :

$$K(S) = \frac{4\pi}{\rho_l} \mathrm{D_A} \ln(1+B_M) = 2 + \frac{0{,}6\, \rho_g^{1/2}\, \|\mathbf{u_g} - \mathbf{u}\|^{1/2}\, S_{cA}^{1/3}}{\mu_g^{1/2} \mathrm{F_M}(B_M)} \frac{S^{1/4}}{\pi^{1/4}} \tag{A.33}$$

En intégrant sur une section, nous obtenons :

$$\begin{aligned}
K^{(k)} &= \frac{8\pi}{\rho_l} \mathrm{D_A} \ln(1+B_M) \\
&\qquad + \frac{2{,}4\, \rho_g^{1/2}\, \|\mathbf{u_g} - \mathbf{u^{(k)}}\|^{1/2}\, S_{cA}^{1/3}}{\rho_l\, \mu_g^{1/2}\, \mathrm{F_M}(B_M)} \frac{\mathrm{D_A} \ln(1+B_M)}{N^{(k)}} \pi^{3/4} \int_{S_{k-1}}^{S_k} S^{1/4} n(S) \mathrm{d}S \\
&= K_{Stokes} + \frac{2{,}4\, \rho_g^{1/2}\, \|\mathbf{u_g} - \mathbf{u^{(k)}}\|^{1/2}\, S_{cA}^{1/3}}{\rho_l\, \mu_g^{1/2}\, \mathrm{F_M}(B_M)} \frac{\mathrm{D_A} \ln(1+B_M)}{N^{(k)}} \pi^{3/4}\, \mathrm{I}_{1/4}
\end{aligned} \tag{A.34}$$

### A.2.3 Combustion des particules d'aluminium : modèle ASSM

**Expression du débit massique**
A l'échelle de la goutte, le débit massique évaporé est égal à :

$$\dot{m}_p = \pi\, d\, \frac{\lambda_g}{c_{p,g}}\, Nu_c\, \ln(1+B_T), \qquad B_T = \frac{c_{p,g}(T_g - T_p) + Q}{L_v}, \quad Nu_c = 2 + 0{,}6\, Re_p^{1/2}\, \mathrm{Pr}^{1/3} \tag{A.35}$$

où $Q$ est la chaleur de réaction par unité de masse.
En sectionnel, l'intégration faite sur une section $k$ est égale à :

$$\dot{m}^{(k)} = \pi^{1/2} \frac{\lambda_g}{c_{p,g}} \ln(1+B_T) \int_{S_{k-1}}^{S_k} Nu_c(S)\, S^{1/2}\, n(S) \mathrm{d}S \tag{A.36}$$

**Expression du taux d'évolution de la surface des gouttes**

$$K(S) = 8\pi \frac{\lambda_g}{\rho_l\, c_{p,g}} \ln(1+B_T) \;+\; 0{,}6\,\mathrm{Pr}^{1/3}\,\pi^{3/4}\,\frac{\lambda_g}{\rho_l\, c_{p,g}} \ln(1+B_T) \frac{\rho_g^{1/2}\,\|\mathbf{u_g}-\mathbf{u}\|^{1/2}}{\mu_g^{1/2}}\, S^{1/4} \quad \text{(A.37)}$$

N.B. Dans le cas où la bicomposition de la goutte est prise en compte ($Al/Al_2O_3$), nous avons $\rho_l$ qui est une fonction de $\rho_{Al}$ et $\rho_{Al_2O_3}$ . De plus, la présence d'une calotte de l'alumine occulte une partie de la surface de la goutte. Une surface effective d'échange de l'aluminium liquide avec la phase gazeuse peut être prise en compte en tant que terme correctif dans le calcul du débit évaporé. Dans ce document, ce terme ne sera pas utilisé dans les calculs.

**Corrélation de Stokes**
Le débit massique vaut :

$$\dot{m}^{(k)}_{Stokes} = 2\,\pi^{1/2}\,\frac{\lambda_g}{c_{p,g}} \ln(1+B_T) \int_{S_{k-1}}^{S_k} S^{1/2} n(S)\mathrm{d}S = 2\,\pi^{1/2}\,\frac{\lambda_g}{c_{p,g}} \ln(1+B_T)\mathrm{I}_{1/2} \quad \text{(A.38)}$$

Le taux d'évolution de la surface de la goutte vaut :

$$K^{(k)} = K = \frac{8\pi\lambda_g}{\rho_l c_{p,g}} \ln(1+B_T) \quad \text{(A.39)}$$

**Corrélation de Ranz-Marshall**
Le débit massique vaut :

$$\dot{m}^{(k)}_{RM} = \dot{m}^{(k)}_{Stokes} + 0{,}6\,\mathrm{Pr}^{1/3}\,\pi^{1/4}\,\frac{\rho_g^{1/2}\,\|\mathbf{u_g}-\mathbf{u^{(k)}}\|^{1/2}}{\mu_g^{1/2}}\,\frac{\lambda_g}{c_{p,g}} \ln(1+B_T)\,\mathrm{I}_{3/4} \quad \text{(A.40)}$$

Le taux d'évolution de la surface de la goutte vaut :

$$K^{(k)} = K_{Stokes} \;+\; 0{,}6\,\mathrm{Pr}^{1/3}\,\pi^{3/4}\,\frac{\lambda_g}{\rho_l\, c_{p,g}} \ln(1+B_T) \frac{\rho_g^{1/2}\,\|\mathbf{u_g}-\mathbf{u^{(k)}}\|^{1/2}}{\mu_g^{1/2}}\,\frac{1}{N^{(k)}}\mathrm{I}_{1/4} \quad \text{(A.41)}$$

### A.2.4 Combustion des particules d'aluminium : modèle "loi du $d^n$"

**Expression du débit massique**
A l'échelle de la goutte, le débit massique évaporé est égal à :

$$\dot{m}_p = \frac{\pi\,\rho_l}{4\,c_n}\,\frac{(d_{init}^{c_n} - d_{res}^{c_n})}{\tau_{comb}}\,Nu_c\,d^{(3-c_n)} \quad \text{(A.42)}$$

où les termes $\tau_{comb}$ et $c_n$ sont des constantes du modèle. Les termes $d_{init}$ et $d_{res}$ sont également des constantes du modèle, ils représentent respectivement la taille initiale des particules d'aluminium et la taille finale des résidus d'alumine.
Cette relation exprimée avec la variable surface $S$ devient :

$$\dot{m}_p = \frac{\rho_l}{4\,c_n}\,\frac{(d_{init}^{c_n} - d_{res}^{c_n})}{\tau_{comb}}\,Nu_c\,\pi^{\frac{(c_n-1)}{2}}\,S^{\frac{(3-c_n)}{2}} \quad \text{(A.43)}$$

En sectionnel, l'intégration faite sur une section $k$ est égale à :

$$\dot{m}^{(k)} = \frac{\rho_l}{4\,c_n}\,\frac{(d_{init}^{c_n} - d_{res}^{c_n})}{\tau_{comb}}\,Nu_c\,\pi^{\frac{(c_n-1)}{2}} \int_{S_{k-1}}^{S_k} Nu_c(S)\,S^{\frac{(3-c_n)}{2}}\,n(S)\mathrm{d}S \quad \text{(A.44)}$$

**Expression du taux d'évolution de la surface des gouttes**

$$K(S) = \frac{1}{c_n}\,\frac{(d_{init}^{c_n} - d_{res}^{c_n})}{\tau_{comb}}\,Nu_c\,\pi^{\frac{c_n}{2}}\,S^{\frac{(2-c_n)}{2}} \quad \text{(A.45)}$$

**Corrélation de Stokes**
Le débit massique vaut :

$$\dot{m}^{(k)}_{Stokes} = \frac{\rho_l}{2\,c_n}\,\frac{(d^{c_n}_{init} - d^{c_n}_{res})}{\tau_{comb}}\,Nu_c\,\pi^{\frac{(c_n-1)}{2}}\,\mathrm{I}_{(3-\mathrm{c_n})/2} \tag{A.46}$$

Le taux d'évolution de la surface d'une goutte appartenant à la section k vaut :

$$K^{(k)} = \frac{1}{N^{(k)}}\frac{2}{c_n}\,\frac{(d^{c_n}_{init} - d^{c_n}_{res})}{\tau_{comb}}\,\pi^{\frac{c_n}{2}}\int_{S_{k-1}}^{S_k} S^{\frac{(2-c_n)}{2}}\,n(S)\mathrm{d}S \tag{A.47}$$

Finalement,

$$K^{(k)} = \frac{1}{N^{(k)}}\frac{2}{c_n}\,\frac{(d^{c_n}_{init} - d^{c_n}_{res})}{\tau_{comb}}\,\pi^{\frac{c_n}{2}}\,\mathrm{I}_{(2-\mathrm{c_n})/2} \tag{A.48}$$

**Corrélation de Ranz-Marshall**
Le débit massique vaut :

$$\dot{m}^{(k)}_{RM} = \dot{m}^{(k)}_{Stokes} + 0{,}15\,\frac{\rho_l}{c_n}\,\mathrm{Pr}^{1/3}\,\frac{\rho_g^{1/2}\,\|\mathbf{u_g} - \mathbf{u^{(k)}}\|^{1/2}}{\mu_g^{1/2}}\,\frac{(d^{c_n}_{init} - d^{c_n}_{res})}{\tau_{comb}}\,\pi^{\frac{(2c_n-3)}{4}}\,\mathrm{I}_{(7-2\mathrm{c_n})/4} \tag{A.49}$$

Le taux d'évolution de la surface de la goutte vaut :

$$K^{(k)} = K_{Stokes} + \frac{0{,}6}{c_n}\,\mathrm{Pr}^{1/3}\,\frac{\rho_g^{1/2}\,\|\mathbf{u_g} - \mathbf{u^{(k)}}\|^{1/2}}{\mu_g^{1/2}}\,\frac{(d^{c_n}_{init} - d^{c_n}_{res})}{\tau_{comb}}\,\frac{1}{N^{(k)}}\,\pi^{\frac{(2c_n-1)}{4}}\,\mathrm{I}_{(5-2\mathrm{c_n})/4} \tag{A.50}$$

# Annexe B

# Acoustique diphasique polydisperse

## B.1 Dérivation de la relation de dispersion polydisperse pour les gouttes évaporant dans leur propre vapeur

Les termes d'interactions diphasiques exprimés en régime de Stokes sont :

$$\begin{cases} \dfrac{1}{m_p}\mathrm{F_p} = \dfrac{u_g - u_p}{\tau_u(S)} & \tau_u(S) = \dfrac{\rho_l\, S}{18\,\pi\,\mu_g} \\ \mathrm{K_p} = \dfrac{8\,\pi\,\lambda_g}{\rho_l\, c_{p,g}} \ln\left(1 + \dfrac{c_{p,g}(T_g - T_p)}{L_v}\right) & \tau_m(S) = \dfrac{\rho_l\, c_{p,g}\, S}{12\,\pi\,\lambda_g} \\ \dfrac{1}{m_p}\mathrm{H_p} = \dfrac{T_g - T_p}{\tau_T(S)} - \dfrac{L_v}{c_{p,l}\,\tau_m(S)} \ln\left(1 + \dfrac{c_{p,g}(T_g - T_p)}{L_v}\right) & \tau_T(S) = \dfrac{3c_{p,l}}{2c_{p,g}}\,\mathrm{Pr}\,\tau_u(S) \end{cases} \tag{B.1}$$

où $\tau_u$, $\tau_T$ et $\tau_m$ sont respectivement les temps caractéristiques dynamique, thermique et évaporant des gouttes. Les propriétés de la phase liquide $c_{p,l}$ et $L_v$ sont assumées constantes quelque soit la taille des gouttes. Dans le contexte de l'acoustique linéaire, nous linéarisons les différentes variables autour de leurs valeurs d'équilibre :

$$\begin{cases} n(t,x,S) = n_0(S) + n'(t,x,S) & \\ u_g(t,x) = u'_g(t,x) & u_p(t,x,S) = u'_p(t,x,S) \\ T_g(t,x) = T_0 + T'_g(t,x) & T_p(t,x,S) = T_0 + T'_p(t,x,S) \\ \dfrac{1}{m_{p,0}}\mathrm{F_p} = \dfrac{u'_g - u'_p}{\tau_u(S)} & h_p(t,x,S) = h_p^0(T_0) + c_{p,l}\,T'_p(t,x,S) \\ \dfrac{1}{m_{p,0}}\mathrm{H_p} = \left[\dfrac{1}{\tau_T(S)} - \dfrac{c_{p,g}}{c_{p,l}\,\tau_m(S)}\right]\left(T'_g - T'_p\right) & \mathrm{K_p} = \dfrac{8\,\pi\,\lambda_g}{\rho_l\, L_v}\left(T'_g - T'_p\right) \end{cases} \tag{B.2}$$

Nous obtenons le système semi-cinétique suivant :

$$\begin{cases} \partial_t n' + n_0\,\partial_x u'_p &= \dfrac{8\,\pi\,\lambda_g}{\rho_l\, L_v}\partial_S\left(n_0\,\left(T'_g - T'_p\right)\right) & \\ \partial_t u'_p &= \dfrac{u'_g - u'_p}{\tau_u(S)} & \partial_t T'_p = \left[\dfrac{1}{\tau_T(S)} - \dfrac{c_{p,g}}{c_{p,l}\,\tau_m(S)}\right]\left(T'_g - T'_p\right) \end{cases} \tag{B.3}$$

Nous discrétisons de façon continue l'espace des tailles à l'aide de sections définis tel que $[S_{k-1}, S_k[$ avec des hypothèses de vitesse et de température constantes : $u'_p(S) = u'^{(k)}$ et $T'_p(S) = T'^{(k)}$. En considérant la méthode TSM-MF, il est possible d'écrire la forme linéarisée de la concentration en

nombre et en masse de gouttes pour chaque section :

$$\left\{\begin{array}{lll} n^{(k)} & = \displaystyle\int_{S_{k-1}}^{S_k} n_0(S)\,\mathrm{d}S + \int_{S_{k-1}}^{S_k} n'(S)\,\mathrm{d}S & = n_0^{(k)} + n'^{(k)} \\ m^{(k)} & = \displaystyle\int_{S_{k-1}}^{S_k} \frac{\rho_l\, S^{3/2}}{6\sqrt{\pi}}\, n_0(S)\,\mathrm{d}S + \int_{S_{k-1}}^{S_k} \frac{\rho_l\, S^{3/2}}{6\sqrt{\pi}}\, n'(S)\,\mathrm{d}S & = m_0^{(k)} + m'^{(k)} \end{array}\right. \tag{B.4}$$

Le système linéarisé d'équations de conservation pour la section $k$ s'écrit :

$$\left\{\begin{array}{ll} \partial_t n'^{(k)} + n_0^{(k)}\,\partial_x u'^{(k)} & = \dfrac{8\,\pi\,\lambda_g}{\rho_l\, L_v}\left[n_0(S)\left(T'_g - T'_p(S)\right)\right]_{S_{k-1}}^{S_k} \\ \partial_t m'^{(k)} + m_0^{(k)}\,\partial_x u'^{(k)} & = \dfrac{8\,\pi\,\lambda_g}{L_v}\left[\dfrac{S^{3/2}}{6\sqrt{\pi}} n_0(S)\left(T'_g - T'_p(S)\right)\right]_{S_{k-1}}^{S_k} \\ & \qquad - \dfrac{12\,\pi\,\lambda_g}{L_v}\left(T'_g - T'^{(k)}\right)\displaystyle\int_{S_{k-1}}^{S_k} \frac{S^{1/2}}{6\sqrt{\pi}}\, n_0(S)\,\mathrm{d}S \\ \partial_t u'^{(k)} = \dfrac{u'_g - u'^{(k)}}{\tau_u(\tilde{S}_k)} & \partial_t T'^{(k)} = \left[\dfrac{1}{\tau_T(\tilde{S}_k)} - \dfrac{c_{p,g}}{c_{p,l}\,\tau_m(\tilde{S}_k)}\right]\left(T'_g - T'^{(k)}\right) \end{array}\right. \tag{B.5}$$

La surface moyenne $\tilde{S}_k$ calculée sur la section $k$ est obtenue à partir de la relation suivante :

$$\left(\tilde{S}_k\right)^{p-q} = \frac{\displaystyle\int_{S_{k-1}}^{S_k} S^{p/2}\, n_0(S)\,\mathrm{d}S}{\displaystyle\int_{S_{k-1}}^{S_k} S^{q/2}\, n_0(S)\,\mathrm{d}S} \tag{B.6}$$

En régime de Stokes, il est démontré que $p = 3$ et $q = 1$ sont les paramètres à choisir. Par soucis de clarté, nous utilisons le formalisme suivant pour écrire les temps de relaxation de chaque section : $\tau_u(\tilde{S}_k) = \tau_u^k$, $\tau_m(\tilde{S}_k) = \tau_m^k$ et $\tau_T(\tilde{S}_k) = \tau_T^k$. La même stratégie de linéarisation est appliquée pour le système d'équations Euler de la phase gazeuse. Les termes sources pour le gaz correspondent à la contribution de toutes les sections :

$$\left\{\begin{array}{ll} \partial_t \rho'_g + \rho_{g,0}\,\partial_x u'_g & = \dfrac{12\,\pi\,\lambda_g}{L_v}\displaystyle\sum_{k=1}^{N_{sec}}\left(T'_g - T'^{(k)}\right)\int_{S_{k-1}}^{S_k}\frac{S^{1/2}}{6\sqrt{\pi}}\, n_0(S)\,\mathrm{d}S \\ \rho_{g,0}\,\partial_t u'_g + \partial_x p' & = -\displaystyle\sum_{k=1}^{N_{sec}} m_0^{(k)}\frac{u'_g - u'^{(k)}}{\tau_u^k} \\ \rho_{g,0}\,c_{v,g}\partial_t T'_g + p_0\partial_x u'_g & = -\displaystyle\sum_{k=1}^{N_{sec}} m_0^{(k)}\left[\frac{1}{\tau_T^k} - \frac{c_{p,g}}{c_{p,l}\,\tau_m^k}\right]\left(T'_g - T'^{(k)}\right) \end{array}\right. \tag{B.7}$$

où $\rho_{g,0}$ représente la densité du gaz à la saturation. Par la suite, nous adimensionons les variables tel que : $\rho = \rho'_g/\rho_{g,0}$, $u = u'_g/c_0$, $T = T'_g/T_0$, $u^{(k)} = u'^{(k)}/c_0$, $T^{(k)} = T'^{(k)}/T_0$. Nous considérons également le rapport $\mu_k = m^{(k)}/\rho_{g,0}$ qui la concentration massique de la section $k$ à la densité du gaz i.e. le taux de chargement de la section. Nous introduisons le terme $\mu_{tot}$ représentant le taux de chargement total de la phase dispersée. Considérant un régime acoustique harmonique $\Phi = \Phi_0 \exp(i(\underline{k}x - \omega t))$, un système analytique peut etre obtenu en supprimant les variations

spatiale et temporelle :

$$\begin{cases} \rho = \dfrac{c_0 \underline{k} u}{\omega} + T \displaystyle\sum_{k=1}^{N_{sec}} \dfrac{\mu_k \lambda h}{(1 - i\omega\tau_T^k)} \\ \\ u \left( 1 + \displaystyle\sum_{k=1}^{N_{sec}} \dfrac{\mu_k}{(1 - i\omega\tau_u^k)} \right) = \dfrac{c_0}{\omega\lambda} \underline{k} \, (\rho + T) \\ \\ T \left( 1 + \displaystyle\sum_{k=1}^{N_{sec}} \dfrac{\mu_k \, \gamma \, h \, (1 - \gamma\phi)}{(1 - i\omega\tau_T^k)} \right) = \dfrac{c_0(\gamma - 1)}{\omega} \underline{k} \, u \end{cases} \tag{B.8}$$

Nous introduisons :

$$\lambda = \frac{c_{p,g} T_0}{L_v}, \qquad \phi = -\frac{\rho_{g,0}(\gamma - 1)}{\gamma \rho_l} \tag{B.9}$$

Finalement, nous résolvons le système analytique afin d'exprimer le nombre d'onde complexe comme une fonction des propriétés du gaz et des gouttes. La relation de dispersion polydisperse est la suivante :

$$\left( \frac{\underline{k} c_0}{\omega} \right)^2 = \frac{\left[ 1 - \gamma \dfrac{c_{p,l}(1 - \lambda(\phi + (\gamma - 1)/\gamma))}{c_{p,g}} \displaystyle\sum_{k=1}^{\mathrm{N_{sec}}} \dfrac{\mu_k}{i\omega\tau_T^k} \right]}{\left[ 1 - \dfrac{c_{p,l}(1 - \phi\lambda)}{c_{p,g}} \displaystyle\sum_{k=1}^{\mathrm{N_{sec}}} \dfrac{\mu_k}{i\omega\tau_T^k} \right]} \left[ 1 + \sum_{k=1}^{\mathrm{N_{sec}}} \frac{\mu_k}{(1 - i\omega\tau_u^k)} \right] \tag{B.10}$$

# Annexe C

# Résultats calcul P230 du chapitre 13

## C.1 Visualisation des champs de la phase gazeuse

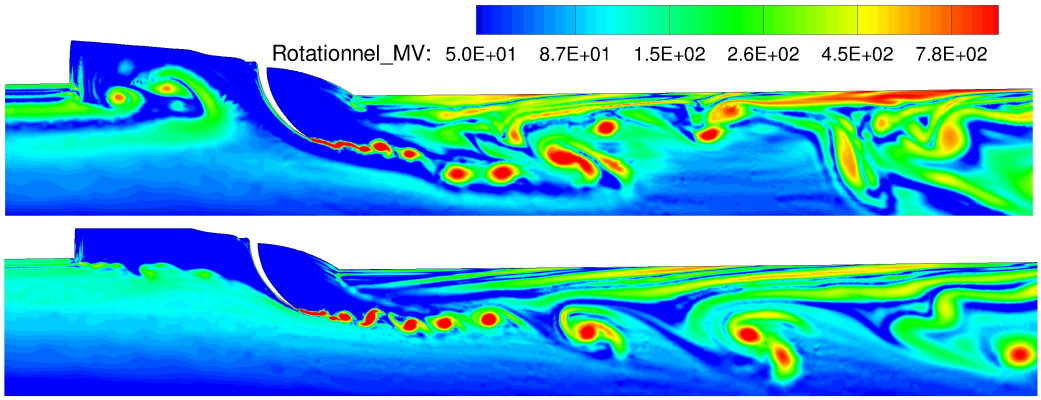


**Figure C.1** – *Champs instantanés de la norme du rotationnel. Visualisation au niveau de la PTF pour les configurations Bidisperse2 (en haut) et GE (en bas)*

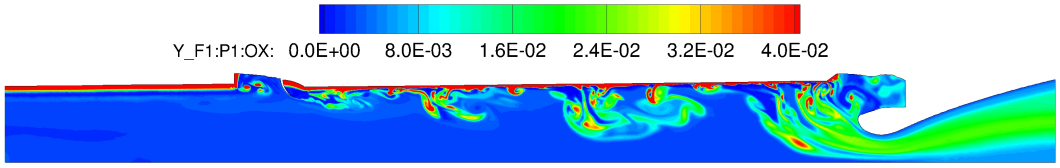


**Figure C.2** – *Champ instantané de la fraction massique de l'espèce OX. Visualisation au niveau du bloc S3 pour la configuration Bidisperse2*

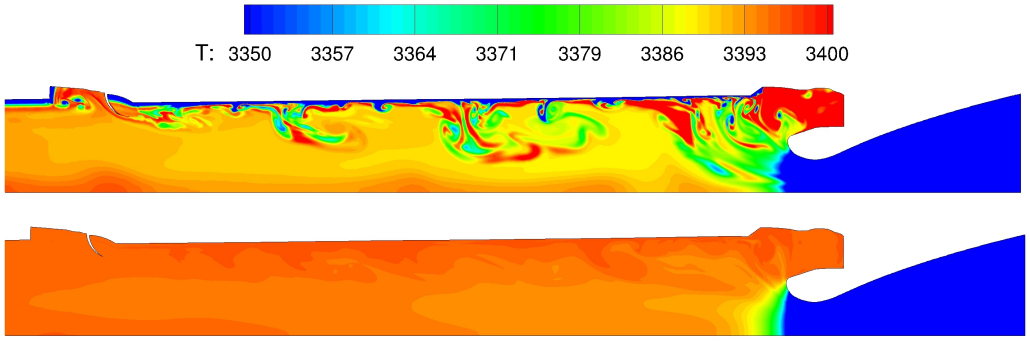


**Figure C.3** – *Champ instantané de la température du gaz. Visualisation au niveau du bloc S3 pour les configurations Bidisperse2 (en haut) et GE (en bas)*

## C.2 Visualisation des champs de la phase dispersée

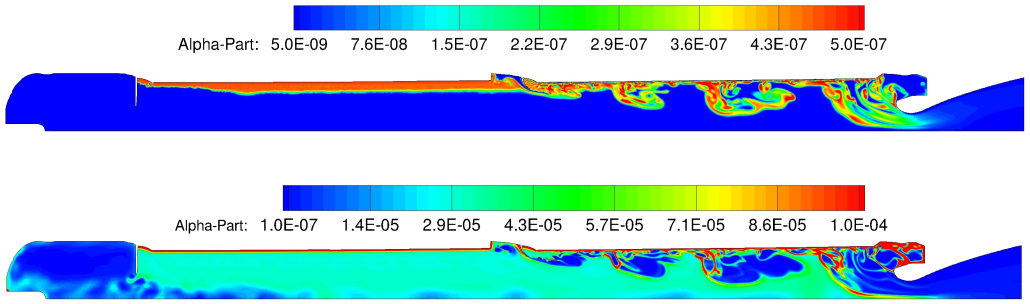


**FIGURE C.4** – *Champs instantanés de la fraction volumique des gouttes. Visualisations des résidus de 3µm (en haut) et des résidus de 60µm (en bas) pour la configuration Bidisperse2*

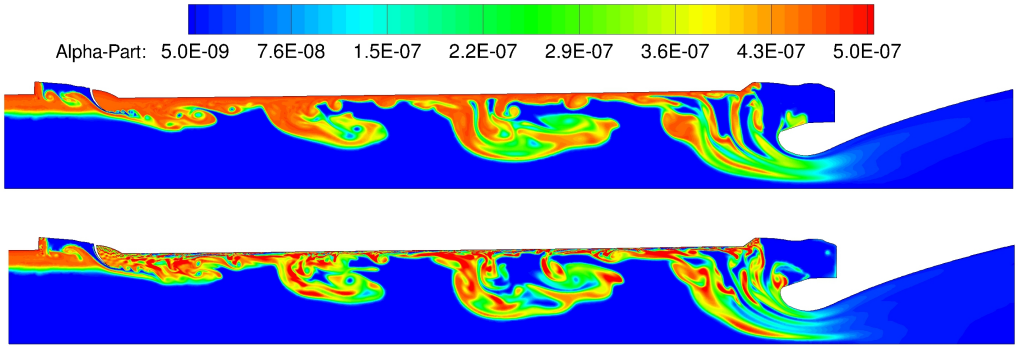


**FIGURE C.5** – *Champs instantanés de la fraction volumique des résidus de 3µm. Visualisation au niveau du bloc S3 pour les configurations Mono+Inerte (en haut) et Bidisperse2 (en bas)*

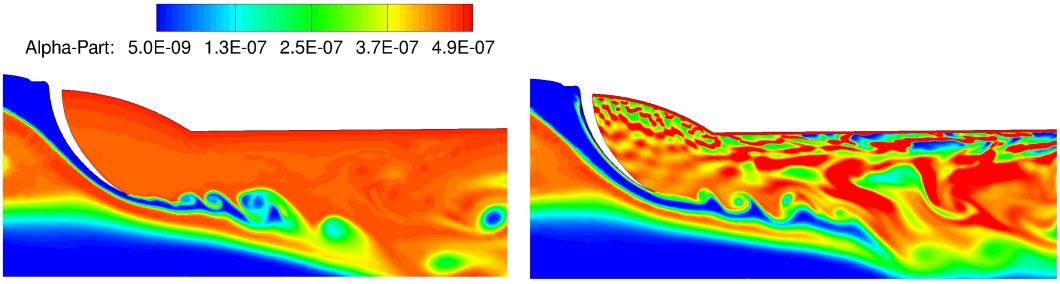


**FIGURE C.6** – *Champs instantanés de la fraction volumique des résidus de 3µm. Visualisation au niveau de la PTF pour les configurations Mono+Inerte (à gauche) et Bidisperse2 (à droite)*

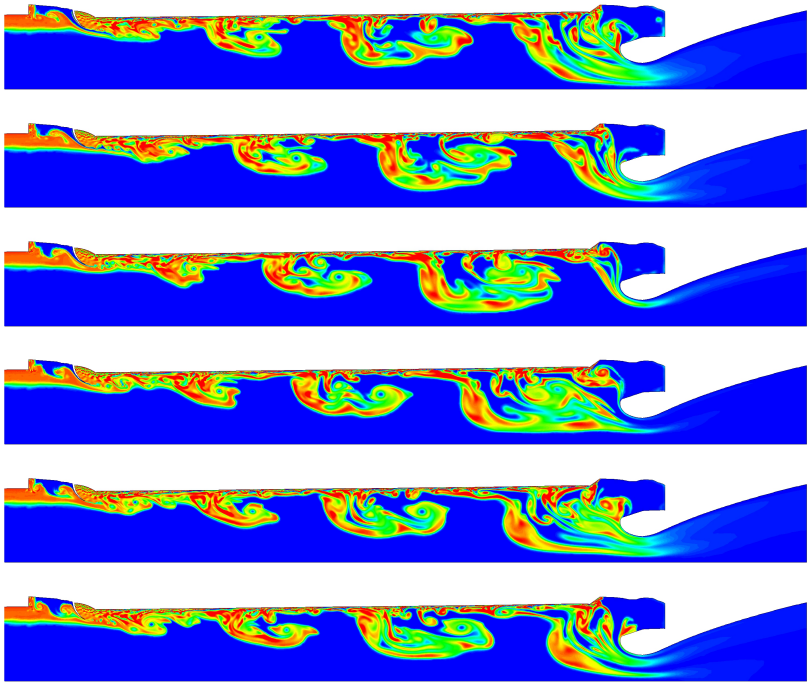

**Figure C.7** – *Champs instantanés de la fraction volumique des résidus de 3µm De haut en bas : 6 instants successifs d'une période d'instabilités*

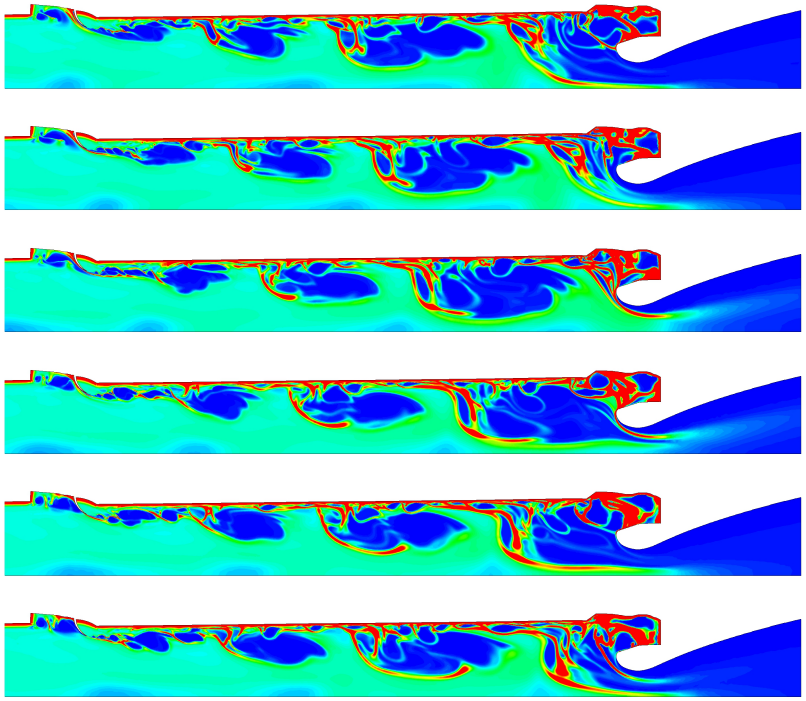

**Figure C.8** – *Champs instantanés de la fraction volumique des résidus de 60µm. De haut en bas : 6 instants successifs d'une période d'instabilités*

Annexe D

# Contribution CICP

# Two-size moment Eulerian multi-fluid model: a flexible and realizable high-fidelity description of polydisperse moderately dense evaporating sprays

Frédérique Laurent[1,2,3,*], Alaric Sibra[1,2,4], François Doisneau[1,2,4]

[1] *CNRS, UPR 288, Laboratoire EM2C, Grande Voie des Vignes, 92295 Chatenay-Malabry, FRANCE*
[2] *Ecole Centrale Paris, Grande Voie des Vignes, 92295 Chatenay-Malabry, FRANCE*
[3] *CNRS, FR 3487, Fédération de Mathématiques de l'Ecole Centrale Paris*
[4] *Département d'Energétique Fondamentale et Appliquée, ONERA, 91120 Palaiseau FRANCE*

**Abstract.** High fidelity modeling and simulation of moderately dense sprays at relatively low cost is still a major challenge for many applications. For that purpose, we introduce a new multi-fluid model based on a two-size moment formalism in sections, which are size intervals of discretization. It is derived from a Boltzmann type equation taking into account drag, evaporation and coalescence, which are representative of the complex terms that arise in multi-physics environments. The closure of the model comes from a reconstruction of the distribution. A piecewise affine reconstruction in size is thoroughly analyzed in terms of stability and accuracy, a key point for a high-fidelity and reliable description of the spray. Robust and accurate numerical methods are then developed, ensuring the realizability of the moments. The model and method are proven to describe the spray with a high accuracy in size and size-conditioned variables, resorting to a lower number of sections compared to one size moment methods. Moreover, robustness is ensured with efficient and tractable algorithms despite the numerous couplings and various algebra thanks to a tailored overall strategy. This strategy is successfully tested on a difficult 2D unsteady case, which proves the efficiency of the modeling and numerical choices.

**Key words**: Polydisperse sprays, Moment methods, Multi-Fluid, Evaporation, Coalescence

## 1 Introduction

Two-phase flows constituted of a gaseous phase carrying a disperse condensed phase play a key role in many industrial and scientific applications e.g. spray combustion in

*Corresponding author. *Email addresses:* frederique.laurent@ecp.fr (F. Laurent), alaric.sibra@gmail.com (A. Sibra, presently at Airbus Defense & Space), francois.doisneau@centraliens.net (F. Doisneau, presently at Sandia National Laboratories)

Diesel engines or aeronautical combustion chambers, heterogeneous energetic materials in solid rocket motors, fluidized beds, *etc*. In all these applications the disperse phase is composed of particles/droplets of various sizes that can possibly evaporate, break-up, coalesce or aggregate, and have their own inertia and size-conditioned dynamics and heating. The needs of research and industrial applications and the availability of powerful computational means appeal for high-fidelity, robust and efficient descriptions of the disperse phase in such flows.

We choose to describe the dynamics of the disperse phase in a statistical sense using a kinetic approach because of its accuracy and flexibility. The disperse phase information is completely contained in the so-called Number Density Function (NDF). The NDF measures an ensemble average (over a given set of initial conditions) number of particles at a specific location in the phase space at a given time. The phase space is determined by the number of internal coordinates that describe the particle state: position, velocity, size, temperature, *etc*. These variables evolve due to physical phenomena: transport, drag force, evaporation, heating, collisions *etc*. which are accounted for through the Williams equation [39]. Moreover, in many applications, the coordinate of the phase space that is the most essential to deal with is size, because the other internal coordinates, such as the velocity or the temperature, are strongly conditioned on it.

There are several strategies to solve this kinetic equation. Lagrangian-Monte-Carlo approach [2, 11, 17] allows to approximate the NDF by a sample of discrete numerical parcels describing particles of various internal coordinates. It is called Direct Simulation Monte-Carlo method (DSMC) in [3] and is generally considered to be the most accurate method for solving this type of equation; it is specially suited for Direct Numerical Simulations (DNS) on canonical configurations since it does not introduce any numerical diffusion. However, the number of parcels required to achieve a satisfactory statistical convergence comes to be high in 3D cases, especially for unsteady configurations, when the size distribution has to be well approximated in addition to the spatial repartition of the spray. To overcome this limitation, Eulerian methods offer a promising alternative. The main objective is then to describe both the size distribution and the velocity (and eventually the temperature) conditioned on size. The size distribution, for the spray as well as for non-inertial particles (aerosol, soots) can be modeled thanks to three types of methods: 1) the sectional methods [15, 35] introducing a discretization of the size variable into intervals called sections, 2) the moment methods (see for example [19, 26, 28, 40, 41]), which consist in writing equations on some moments of the NDF, 3) the class methods, sampling the size variable (see citations of [8] and [33]). The velocity and temperature can be easily considered by class methods. However, these methods suffer from their inability to tackle integral terms except at the cost of strong modal simplifications. For the other methods, moments are used to capture the velocity (or temperature) conditioned on size. For the spray, a sectional type method, called multi-fluid, was then rigorously derived from the kinetic model [24, 25], considering only zero and first order moments in velocity. It leads to a good description of the size polydispersity and size-velocity correlations of evaporating sprays with small enough droplets, at a reduced cost compared to DSMC [6], since

deterministic methods of discretization in the spatial dimension are affordable and efficient. For bigger droplets, higher order moments have to be considered [20], such as the velocity dispersion, for example using a Gaussian closure [12,31,32,37]. This multi-fluid methods can reproduce accurately the size distribution, as well as the size-conditioned velocity if a large enough number of sections are used, but they remain usually too costly for practical applications. The moments methods allows the use of a smaller number of variables, a closure being often done by reconstructing a NDF from these moments, but it does usually not allow to accurately solve the NDF. Moreover, this induces complications when there are several internal variables and realizable numerical schemes are difficult to design, i.e. schemes ensuring that the vector of conserved quantities is always a moment of some distribution. Still some satisfactory solutions are given for particular cases in [14,21,27,40].

To improve multi-fluid methods, several size moments can be considered in each section in order to be able to decrease the number of sections and then the overall cost of the method, for the same accuracy. It leads to some hybrid method between sectional and moment methods and the NDF is reconstructed inside the section. This reconstruction has to be efficient and accurate since it has to be done in each cell at each time step to close the equations. Such kind of hybrid method was developed in [23] for the description of the evaporation, using a polynomial reconstruction of the size NDF to close the equations, or a bi-affine one for the case of the two moment method, in order to ensure the positivity of this NDF. The interest of using two size moments inside the section, instead of an affine NDF reconstruction of MUSCL type from one moment per section, was also clearly shown on the accuracy of the method. However, only integer moments in the droplet surface variable were considered, in such a way that the mass density were only recovered thanks to the reconstruction. Moreover, the numerical analysis of the method were done only for the case the polynomial reconstruction in the section, not for the bi-affine one, which is always positive. Another two size moment (TSM) method [9,10] uses two important variables in each section: the number density and the mass density. To automatically ensure its positivity, an exponential function is used as the reconstruction in the sections, similarly to what is obtained with the entropy maximization strategy [29]. It was used for for the simulation of dynamics and coalescence of particles in solid propellant combustion [9] but two limitations were exposed in that work: first the complexity and cost of the inversion algorithm and second its lack of accuracy -especially on steep and strongly varying size distributions- as a result of a numerical limitation to prevent overflows during inversion. More than two moments were also used for the description of evaporating dilute sprays, with the entropy maximization strategy for the reconstruction [19,21,27,38]. This method showed its potential for the simulation of the injection of a liquid disperse phase into a gas for automotive engine applications. However, the more moments are used, the more realizability conditions has to be respected, demanding the development of realizable numerical methods and algorithms, which do not degrade the computational efficiency. Moreover, all the hybrid methods reviewed above use a constant reconstruction of the velocity in the section, thus limiting the description

of size-velocity correlations inside the section, except [38], where a size-velocity moment is added, which brings in additional difficulties.

In this paper, the objective is to write a model on physically important variables in the sections, with a limited number of constraints on it (the realizability conditions) and with a closure thanks to a very simple, robust and accurate reconstruction. To limit the constraints, only the TSM methods are then considered. Moreover, a piecewise affine reconstruction for the size distribution, from the number and mass density, is considered, in the simplest way allowing to ensure its positivity. Since it is a keypoint both in terms of cost and accuracy of the method, this reconstruction is analyzed and compared to the exponential one. The velocity description inside the section is also improved, without considering any additional moment. Accurate and realizable schemes are then developed and validated for two categories of physical phenomena that are evaporation -a continuous drop size variation (derivative operator)- and coalescence -a discontinuous, non-linear, drop size variation (integral source term), in conjunction with the treatment of drag. This is done for each of such operator separately, in the perspective of the use of operator splitting for the complete problem and it comforts us on the fact that other phenomena can be treated as well (condensation, break-up, heating) but this is not discussed further for the sake of clarity and size of the paper. Some realizable transport schemes being given in [10, 21, 38] for structured meshes and in [36] for TSM on unstructured ones, this issue is no more discussed here. Finally, a comprehensive test case, exhibiting the size/velocity couplings [9] through drag, evaporation and coalescence, is performed with the chosen approach, allowing to assess its potential on realistic problems.

The paper is organized in the following way. In section 2 we introduce the multi-fluid model for a disperse phase. In section 3 we detail reconstruction techniques for the size and size-conditioned variables with a particular focus on numerical properties of accuracy, stability and cost. In section 4 we present and we systematically assess numerical schemes for the resolution of the evaporation part of the multi-fluid system. In section 5 a numerical scheme for the coalescence part of the multi-fluid system is devised and assessed. Finally in section 6 the full strategy is tested on a 2D unsteady case, which proves the efficiency of the modeling and numerical choices.

## 2 Eulerian spray modeling

Eulerian multi-fluid models can be derived from a kinetic model describing transport, drag, evaporation, heating, collisions and breakup [9, 10, 24, 25]. Here, it is done from a simplified kinetic model, extracting the main difficulties by considering the different categories of physical phenomena in the simplest way: transport, drag force inducing a size-velocity coupling, evaporation, which is an advection in the size phase space and coalescence, which is an integral source term. Moreover a particular attention will be devoted in this paper to ensure that the methods developed are applicable to more complex laws and to other phenomena, this application effort being done in another piece of work

for complex drag, evaporation and heating laws [34].

## 2.1 A kinetic description: the Williams equation

A dilute or moderately dense spray can be described by its number density function (NDF) $f^{\phi}$, where $f^{\phi}(t,\boldsymbol{x},\phi,\boldsymbol{u},T)\mathrm{d}\boldsymbol{x}\mathrm{d}\boldsymbol{u}\mathrm{d}\phi$ denotes the average number of droplets (in a statistical sense) at time $t$, in a volume of size $\mathrm{d}\boldsymbol{x}$ around a space location $\boldsymbol{x}$, with a velocity in a $\mathrm{d}\boldsymbol{u}$-neighborhood of $\boldsymbol{u}$, with a temperature in a $\mathrm{d}T$-neighborhood of $T$ and with a size in a $\mathrm{d}\phi$-neighborhood of $\phi$. The droplets are assumed to be spherical and characterized by one geometry parameter $\phi$, which can be the radius $R$, the surface $S$ of the volume $V$. All variables being considered as non-dimensional, the relation between these size parameters are given by $S=R^2$ and $V=R^3$. The NDF being the same in all three representations, we notice that $f^R\mathrm{d}R=f^S\mathrm{d}S=f^V\mathrm{d}V$.

For the sake of simplicity and for the purpose of this paper, we consider that the evaporation process is described by a $d^2$ law without convective corrections, that the drag force is given by a Stokes law, and finally that the unsteady heating of the droplets does not need to be modeled so that the evaporation law coefficient does not depend on the heating status of the droplet and the variable $T$ is no longer considered. We refer to [9,33] for a consideration of heating.

The evolution of the NDF is described by the following Boltzmann-type equation [39]:

$$\partial_t f^{\phi}+\partial_{\boldsymbol{x}}\cdot(\boldsymbol{u}f^{\phi})+\partial_{\boldsymbol{u}}\cdot(\boldsymbol{F}f^{\phi})-\partial_{\phi}(\mathcal{K}_{\phi}f^{\phi})=\frac{1}{\mathrm{Kn}}\Gamma(f^{\phi},f^{\phi}), \tag{2.1}$$

where Kn is the Knudsen number. The Stokes drag force per unit mass is given by $\boldsymbol{F}=(\boldsymbol{u}_g-\boldsymbol{u})/\mathrm{St}$, where $\boldsymbol{u}_g$ is the gas velocity and the Stokes number St is linear as a function of the droplet surface $S(\phi)$: $\mathrm{St}=\mathcal{A}S(\phi)$. The evaporation rate $\mathcal{K}_{\phi}=\mathcal{K}_S/S'(\phi)$ is such that $\mathcal{K}_S$ is a constant, denoted $\mathcal{K}$ in the following. The kinetic modeling for the collision operator is taken from [18, 25]. Then, in our context of dilute to moderately dense sprays, only binary collisions are taken into account and the mean collision time is assumed very small compared to the inter-collision time. Moreover, the mass and the momentum of droplets are supposed to be preserved during the collision. Finally, we assume that every collision leads to coalescence. This last assumption is discussed in [1,17] since colliding droplets can bounce on each other or separate by reflexion or stretching if the remaining internal kinetic energy of the new droplet is too high. It brings in no limitation of this proposed framework. The collision operator resulting from these hypotheses is developed as $\Gamma(f^V,f^V)=Q^+ + Q^-$ where $Q^+$ and $Q^-$ respectively correspond to the quadratic integral operators associated with creation and destruction of droplets due to coalescence [17]:

$$Q^-=-\int_{V^*}\int_{\boldsymbol{u}^*} f^V(t,\boldsymbol{x},V,\boldsymbol{u})f^V(t,\boldsymbol{x},V^*,\boldsymbol{u}^*)\beta\left((V)^{\frac{1}{3}},(V^*)^{\frac{1}{3}}\right)|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}^*|\mathrm{d}V^*\mathrm{d}\boldsymbol{u}^*$$

$$Q^+=\frac{1}{2}\int_{V^*\in[0,V]}\int_{\boldsymbol{u}^*} f^V(t,\boldsymbol{x},V^{\diamond},\boldsymbol{u}^{\diamond})f^V(t,\boldsymbol{x},V^*,\boldsymbol{u}^*)\beta\left((V^*)^{\frac{1}{3}},(V^{\diamond})^{\frac{1}{3}}\right)|\boldsymbol{u}^{\diamond}-\boldsymbol{u}^*|J\mathrm{d}V^*\mathrm{d}\boldsymbol{u}^*$$

where, considering two precursor droplets of volumes $V^*$ and $V^\diamond$ colliding to form a new droplet of volume $V$, the mass and momentum conservation are written: $V^\diamond = V - V^*$ and $V^\diamond \boldsymbol{u}^\diamond = V\boldsymbol{u} - V^*\boldsymbol{u}^*$. Moreover, $J$ is the Jacobian of the mapping $(V,\boldsymbol{u}) \mapsto (V^\diamond,\boldsymbol{u}^\diamond)$ and $\beta(r^*,r^\diamond) = \pi(r^*+r^\diamond)^2$ is the impact parameter. Let us remark that a collision efficiency can be considered in the coalescence kernel [9] but is equal to one here, for the sake of simplicity.

This equation is not solved directly, but a system of equations on moments of $f^\phi$ is derived from it. The formalism and the associated assumptions needed to derive the Eulerian multi-fluid models are introduced in [24] and extended to the consideration of coalescence in [25]. We recall the two main steps, which are the semi-kinetic and the sectional integrations in order to precisely introduce the new models considered in the present contribution.

## 2.2 Semi-kinetic model

In a first step, we reduce the phase space to the only droplet size variable. We then only consider the first two moments in the velocity variable:

$$n^\phi(t,\boldsymbol{x},\phi) = \int_{\boldsymbol{u}\in\mathbb{R}} f^\phi(t,\boldsymbol{x},\boldsymbol{u},\phi)\mathrm{d}\boldsymbol{u}, \qquad n^\phi(t,\boldsymbol{x},\phi)\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{d}}(t,\boldsymbol{x},\phi) = \int_{\boldsymbol{u}\in\mathbb{R}} \boldsymbol{u} f^\phi(t,\boldsymbol{x},\boldsymbol{u},\phi)\mathrm{d}\boldsymbol{u}. \tag{2.2}$$

The mono-kinetic assumption [24] is used to close the equations, meaning that, at a given time and space location, the droplets having the same sizes have the same velocities, with no dispersion:

$$f^\phi(t,\boldsymbol{x},\boldsymbol{u},\phi) = n^\phi(t,\boldsymbol{x},\phi)\delta(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{d}}(t,\boldsymbol{x},\phi)). \tag{2.3}$$

This assumption is reasonable for dispersed sprays when the Stokes number St is small enough [6]. For more inertial droplets, higher order velocity moments have to be considered [12, 20, 37], but this is not in the scope of this paper. For denser sprays, for which collisions can occur, this monokinetic assumption has been discussed in [25]. Indeed, the coalescence source term induces a velocity dispersion, since there is no reason for a droplet created by the coalescence of two droplets of various sizes, which is deduced from momentum conservation, to exactly match the velocity corresponding to its new size. In [25], the Eulerian multi-fluid model was considered as a projection of the original distribution function at the kinetic level onto a 1D sub-manifold. The semi-kinetic model, giving equation on $n^\phi$ and $n^\phi\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{d}}$ is then obtained by assuming a Gaussian velocity distribution and taking the limit when the dispersion of this distribution tends to zero. This leads to the following system, written for $\phi = V$ for the sake of simplicity, dropping

the $V$ superscript in $n^V$ to simplify the notations:

$$\partial_t n+\partial_{\boldsymbol{x}}(n\boldsymbol{u_d})-\partial_V(\mathcal{K}_V n)=\frac{1}{\mathrm{Kn}}\left(-n(V)\int_0^\infty n(V^*)\beta(V,V^*)|\boldsymbol{u_d}(V)-\boldsymbol{u_d}(V^*)|\mathrm{d}V^*\right.$$
$$\left.+\frac{1}{2}\int_0^V n(V-V^*)n(V^*)\beta(V-V^*,V^*)|\boldsymbol{u_d}(V^*)-\boldsymbol{u_d}(V-V^*)|\mathrm{d}V^*\right),$$
$$\partial_t(n\boldsymbol{u_d})+\partial_{\boldsymbol{x}}(n\boldsymbol{u_d}\otimes\boldsymbol{u_d})-\partial_V(\mathcal{K}_V n\boldsymbol{u_d})=n(V)\frac{\boldsymbol{u}_g-\boldsymbol{u_d}(V)}{\mathrm{St}(V)}$$
$$+\frac{1}{\mathrm{Kn}}\left(-n(V)\boldsymbol{u_d}(V)\int_0^\infty n(V^*)\beta(V,V^*)|\boldsymbol{u_d}(V)-\boldsymbol{u_d}(V^*)|\mathrm{d}V^*\right.$$
$$\left.+\frac{1}{2}\int_0^V n(V-V^*)n(V^*)\beta(V-V^*,V^*)\frac{(V-V^*)\boldsymbol{u_d}(V-V^*)+V^*\boldsymbol{u_d}(V^*)}{V}|\boldsymbol{u_d}(V^*)-\boldsymbol{u_d}(V-V^*)|\mathrm{d}V^*\right).$$

### 2.3 Multi-fluid models

The second modeling step leading to the Eulerian multi-fluid model is described in [9, 24, 25]. It relies on the choice of a discretization $0=\phi_0<\phi_1<\cdots<\phi_N=\phi_{max}$ for the droplet size phase space, where $\phi_{max}$ can eventually be equal to infinity. A system of conservation equations is then written for each fixed interval $[\phi_{k-1},\phi_k]$ called section. The set of droplets in one section can then be seen as a "fluid" exchanging mass and momentum. In the original Eulerian multi-fluid model [24, 25], only the mass density and the momentum corresponding to each section are considered, dimensionless here:

$$m_k=\int_{\phi_{k-1}}^{\phi_k}V(\phi)n^\phi(\phi)\mathrm{d}\phi,\qquad m_k u_k=\int_{\phi_{k-1}}^{\phi_k}V(\phi)\boldsymbol{u_d}(\phi)n^\phi(\phi)\mathrm{d}\phi, \tag{2.4}$$

where $V(\phi)$ is the volume corresponding to the size variable: $V(R)=R^3$, $V(S)=S^{3/2}$. Only one size moment is then considered: the moment of order $3/2$ if the size variable is the surface, as advised in [22]. This method is referred to as the One Size Moment (OSM) method in the following. For a better description of the size distribution inside each section, some extension of the model using two moments were developed in [9], adding the number density of the section, which is the moment of order 0:

$$n_k=\int_{\phi_{k-1}}^{\phi_k}n^\phi(\phi)\mathrm{d}\phi. \tag{2.5}$$

This model is referred to as Two Size Moment (TSM) model and it is the subject of the present paper. Since two moments are involved, a realizability constraint appears, so that they remain moments of a positive NDF on the considered interval:

$$0<V(\phi_{k-1})n_k<m_k<V(\phi_k)n_k,\qquad\text{or}\quad n_k=m_k=0. \tag{2.6}$$

To close the equations for the OSM or TSM method, the size distribution and the velocity are reconstructed from the moments in the section:

$$n^{\phi}(\phi) = \sum_{k=1}^{N} \kappa_k(\phi) \mathbb{1}_{[\phi_{k-1},\phi_k]}(\phi), \qquad \boldsymbol{u_d}(\phi) = \sum_{k=1}^{N} \chi_k(\phi) \mathbb{1}_{[\phi_{k-1},\phi_k]}(\phi). \tag{2.7}$$

The resulting equations are then:

$$\partial_t n_k + \partial_{\boldsymbol{x}}(n_k u_k) = \mathcal{N}^{(k+\frac{1}{2})} - \mathcal{N}^{(k-\frac{1}{2})} + \frac{1}{\mathrm{Kn}} \left( \mathcal{Q}_k^{n+} - \mathcal{Q}_k^{n-} \right), \tag{2.8}$$

$$\partial_t m_k + \partial_{\boldsymbol{x}}(m_k u_k) = \mathcal{E}^{(k+\frac{1}{2})} - \mathcal{E}^{(k-\frac{1}{2})} - \mathcal{M}^{(k)} + \frac{1}{\mathrm{Kn}} \left( \mathcal{Q}_k^{m+} - \mathcal{Q}_k^{m-} \right), \tag{2.9}$$

$$\partial_t (m_k u_k) + \partial_{\boldsymbol{x}}(m_k \mathcal{U}_2^{(k)}) = \mathcal{E}_u^{(k+\frac{1}{2})} - \mathcal{E}_u^{(k-\frac{1}{2})} - \mathcal{M}_u^{(k)} + m_k F^{(k)} + \frac{1}{\mathrm{Kn}} \left( \mathcal{Q}_k^{mu+} - \mathcal{Q}_k^{mu-} \right), \tag{2.10}$$

where the fluxes for the evaporation, with an upwind formulation, are written:

$$\mathcal{N}^{(k-\frac{1}{2})} = \mathcal{K} \kappa_k(\phi_{k-1}), \quad \mathcal{E}^{(k-\frac{1}{2})} = \mathcal{K} V(\phi_{k-1}) \kappa_k(\phi_{k-1}), \quad \mathcal{M}^{(k)} = \int_{\phi_{k-1}}^{\phi_k} V'(\phi) \mathcal{K} \kappa_k(\phi) \mathrm{d}\phi,$$

$$\mathcal{E}_u^{(k-\frac{1}{2})} = \mathcal{K} V(\phi_{k-1}) \kappa_k(\phi_{k-1}) \chi_k(\phi_{k-1}), \quad \mathcal{M}_u^{(k)} = \int_{\phi_{k-1}}^{\phi_k} V'(\phi) \mathcal{K} \kappa_k(\phi) \chi_k(\phi) \mathrm{d}\phi.$$

The transport term and the drag term are given by

$$m_k \mathcal{U}_2^{(k)} = \int_{\phi_{k-1}}^{\phi_k} \kappa_k(\phi) \chi_k(\phi) \otimes \chi_k(\phi) \mathrm{d}\phi, \qquad m_k F^{(k)} = \int_{\phi_{k-1}}^{\phi_k} V(\phi) \frac{\boldsymbol{u_g} - \chi_k(\phi)}{\mathrm{St}(\phi)} \kappa_k(\phi) \mathrm{d}\phi.$$

and the coalescence source terms are:

$$\mathcal{Q}_k^{n+} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} Q_{ijk}^{1}, \qquad \mathcal{Q}_k^{n-} = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} Q_{kij}^{1}, \quad \mathcal{Q}_k^{m+} = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} Q_{ijk}^{2*}, \qquad \mathcal{Q}_k^{m-} = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} Q_{kij}^{2*},$$

$$\mathcal{Q}_k^{mu+} = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} Q_{ijk}^{3*}, \qquad \mathcal{Q}_k^{mu-} = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} Q_{kij}^{3*},$$

with

$$\begin{pmatrix} Q_{ijk}^{1} \\ Q_{ijk}^{2*} \\ Q_{ijk}^{3*} \end{pmatrix} = \iint_{\mathcal{D}_{ijk}} \left| \chi_j(r^2) - \chi_j\left(r^{\diamond 2}\right) \right| \begin{pmatrix} 1 \\ r^3 \\ r^3 \chi_j(r^2) \end{pmatrix} \kappa_i(r) \kappa_j(r^{\diamond}) \beta(r, r^{\diamond}) \mathrm{d}r \mathrm{d}r^{\diamond}. \tag{2.11}$$

where $\mathcal{D}_{ijk} = \{(r^*, r^{\diamond}) \in [r_{i-1}, r_i] \times [r_{j-1}, r_j], \quad (r^*)^3 + (r^{\diamond})^3 \in [r_{k-1}^3, r_k^3]\}$ [9].

One obtains a system on $m_k$ and $m_k u_k$ for OSM, with the constraint $m_k \geq 0$ and on $n_k$, $m_k$ and $m_k u_k$ for TSM under the realizability constraint (2.6). This system is closed as soon as the size and velocity reconstructions are given. It means that one has to define

some $\kappa_k \geq 0$ and $\chi_k$ from the considered variables with the constraints (2.4) and (2.5) for TSM. For OSM [24,25], constant reconstructions in the sections were used. The TSM leads to a more accurate description of the size distribution inside the section, depending on how the reconstruction is done. This key point is thoroughly analyzed in the next section and will condition the good behavior and the accuracy of the model. Moreover, a key improvement of the velocity reconstruction is proposed, without adding any moments, which will be essential for an accurate and robust description of the spray dynamics.

# 3 Size and velocity reconstruction from the moments

We first deal with the size reconstruction, which is the most sensitive part in term of robustness and accuracy. Both the exponential reconstruction [9] and a new affine reconstruction are considered. The analysis of the latter is then given in terms of stability and accuracy. The two reconstructions are then compared on specific test cases. Finally, two types of velocity reconstructions are described: constant or affine in the section.

In the following, the size variable is the droplet surface $S$ since it was shown to be the best choice for purely evaporating cases (see [22] and Appendix A). Indeed, the influence of the behavior of the NDF at zero size induced by this choice is important when considering evaporation, whereas it has no real impact on phenomena like coalescence.

## 3.1 Size reconstruction

We consider the discretization $0 = S_0 < S_1 < \cdots < S_N = S_{max}$ of the size interval $[0, S_{max}[$ and one denotes $\Delta S_k = S_k - S_{k-1}$ for each $k \in \{1,2,\ldots,N\}$ and $\Delta S = \min_{k\in\{1,2,\ldots,N\}} \Delta S_k$. The distribution $\kappa_k$ is here reconstructed from the moments of order 0 and 3/2, $n_k$ and $m_k$, such that:

$$n_k = \int_{S_{k-1}}^{S_k} \kappa_k(S)\mathrm{d}S, \qquad m_k = \int_{S_{k-1}}^{S_k} S^{3/2}\kappa_k(S)\mathrm{d}S.$$

The realizability condition (2.6) is then written, here: $0 < S_{k-1}^{3/2} n_k < m_k < S_k^{3/2} n_k$ or $n_k = m_k = 0$. An exponential form of the reconstruction was first used [9, 10], automatically ensuring non-negativity for the reconstruction. But due to its computational drawbacks, we decide to introduce here a simple affine reconstruction in a way also ensuring non-negativity.

### 3.1.1 Exponential reconstruction

In [9, 10], a reconstruction of the distribution is chosen as an exponential in each section:

$$f_a(S) = a_k \exp(-b_k(S - S_{k-1})), \qquad S \in [S_{k-1}, S_k]. \tag{3.1}$$

The values of the two parameters $a_k$ and $b_k$ are computed so that the moments of order 0 and 3/2 of $f_a$ on the section $[S_{k-1}, S_k]$ are exactly $n_k$ and $m_k$. It can then be shown [10]

10

that $b_k$ is the unique zero of the function $b \mapsto g_k(b) - \frac{m_k}{n_k}$, where $g_k$ is defined for $b \in \mathbb{R}$ by:

$$g_k(b) = \frac{\int_{S_{k-1}}^{S_k} S^{3/2} e^{-bS} \mathrm{d}S}{\int_{S_{k-1}}^{S_k} e^{-bS} \mathrm{d}S} \tag{3.2}$$
$$= \frac{1}{1-e^{-b\Delta S_k}} \left[ S_{k-1}^{3/2} - S_k^{3/2} e^{-b\Delta S_k} + \frac{3}{2b} \left( \sqrt{S_{k-1}} - \sqrt{S_k} e^{-b\Delta S_k} \right) + \frac{3e^{bS_{k-1}}}{2b} \int_{\sqrt{S_{k-1}}}^{\sqrt{S_k}} e^{-br^2} \mathrm{d}r \right]$$

and $a_k$ is given by:

$$a_k = \frac{b_k}{1-\exp(-b_k \Delta S_k)} n_k. \tag{3.3}$$

Numerically, Ridders' method [30] is used to compute $b_k$ by solving the non-linear system $g_k(b) = \frac{m_k}{n_k}$. This function $g_k(b)$ is computed using the Dawson's integral for $b < 0$, the exponentially-scaled complementary error function for $b > 0$ and a Taylor expansion is used to spare cost for small values of $|b|$, a particular attention being devoted to the junctions. The function $g_k$ is then quite costly to compute and the resolution of the non-linear problem induces usually about 7 to 17 † evaluations of $g_k$ to converge with an error smaller than $10^{-4}$. Moreover, the reconstruction's accuracy and stability are threatened by overflow for large values of $|b|$ so that $b_k$ is searched in the interval $\left[ -\frac{X}{\Delta S_k}, \frac{X}{\Delta S_k} \right]$, where $e^X$ is the overflow constant. Moreover, errors are still encountered at the inversion step for large values of $|b|$. It corresponds to sections where the moment vector $(n_k, m_k)$ is closed to the boundary of the moment space [38], i.e. where the mean volume $\frac{m_k}{n_k}$ is closed to $S_{k-1}^{3/2}$ or $S_k^{3/2}$. Indeed, the derivative of $g_k(b)$ is then very low, behaving as $b^{-2}$ or even $b^{-2.5}$ in the first section. This means that a small error on the ratio $\frac{m_k}{n_k}$ induces quite a large error on $b_k$. And the error on the parameter $b_k$ induces an error of the same order times $\Delta S_k$, for the value of the reconstructed function at one bound of the section, since $n_k = O(\Delta S_k)$ and:

$$f_a(S_{k-1}) = \frac{b_k}{1-\exp(-b_k \Delta S_k)} n_k, \qquad f_a(S_k) = \frac{b_k}{\exp(b_k \Delta S_k) - 1} n_k.$$

All that limits the accuracy of the method if steep distributions are handled. Concerning the cost, the reconstruction itself can be costly due to the large number of evaluation of a costly function. Moreover, computing source terms such as (2.11) can also be costly. Since no analytical formula can be written, computation based on a quadrature of the measure $\kappa_k(S)\mathrm{d}S$ was proposed in [9], allowing a good accuracy, even when large $|b_k|$

†For the result fo section 3.1.5, the accuracy is obtained thanks to a smaller tolerance ($10^{-8}$) on the evaluation of the $b_k$, then demanding 9 to 25 evaluations of $g_k$ in most cases.

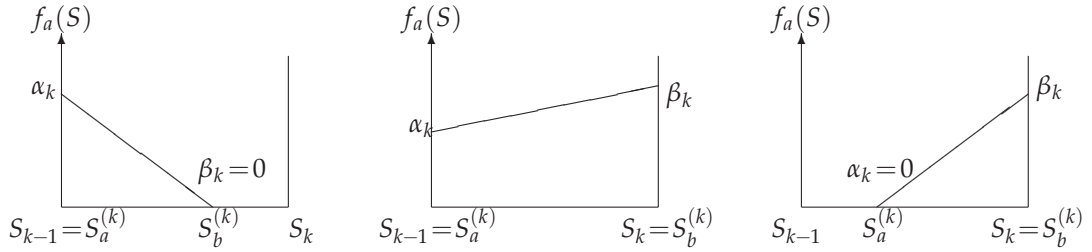


Figure 1: The three types of affine reconstructions.

are involved, but at the price of a computation of quadrature points at each time step and for each section. Then, because of its possible lack of accuracy and high cost, which will be experienced in section 3.1.5, (and also in sections 4.1.4 and 5.2 for the cost for the evaporation and coalescence operators), an alternative reconstruction is proposed.

### 3.1.2 Affine reconstruction

There is a great interest in using as simple functions as polynomial ones for the reconstruction, hopping then an easy computation of the source terms and also a simplification of the computation of this reconstruction. However, their positivity is no more ensured. Here, for TSM, a simplified version of the positive bi-affine reconstruction of [23] is proposed, from the moment of order 0 and 3/2 whereas moments of order 0 and 1 were considered in [23]. So we will first show how this kind of reconstruction can always be done. Then, some nice stability and accuracy properties are shown for this new piecewise affine reconstruction, in the context of the approximation of regular functions, which are essential for a good accuracy of our spray simulations.

The reconstructed function $f_a$ is then taken continuous inside each section $]S_{k-1},S_k[$ and affine on the whole section or on a part of it, the function being zero elsewhere. This function can then be written:

$$f_a(S)=\begin{cases} 0 & \text{if } S_{k-1}\le S\le S_a^{(k)} \\ \alpha_k+(\beta_k-\alpha_k)\frac{S-S_a^{(k)}}{S_b^{(k)}-S_a^{(k)}} & \text{if } S_a^{(k)}\le S\le S_b^{(k)} \\ 0 & \text{if } S_b^{(k)}\le S\le S_k \end{cases} \qquad i\in\{1,\dots,N\}, \tag{3.4}$$

with only three considered cases illustrated in Figure 3:

[C.1] $S_b^{(k)}\in]S_{k-1},S_k[$, $S_a^{(k)}=S_{k-1}$ and $\beta_k=0$.

[C.2] $S_a^{(k)}=S_{k-1}$ and $S_b^{(k)}=S_k$.

[C.3] $S_a^{(k)}\in]S_{k-1},S_k[$, $S_b^{(k)}=S_k$ and $\alpha_k=0$.

Let us denote $R_{k-1}=\sqrt{S_{k-1}}$, $R_b=\sqrt{S_b^{(k)}}$ and

$$\mu_{inf}^{(k)}=\frac{2}{\Delta S_k^2}\int_{S_{k-1}}^{S_k}(S_k-S)S^{3/2}\mathrm{d}S, \qquad \mu_{sup}^{(k)}=\frac{2}{\Delta S_k^2}\int_{S_{k-1}}^{S_k}(S-S_{k-1})S^{3/2}\mathrm{d}S.$$

12

These two last scalars belong to $]S_{k-1}^{3/2}, S_k^{3/2}[$. The values of the parameters of the reconstruction (3.4) are then given in the following proposition.

**Proposition 3.1** (Piecewise affine reconstruction)**.** Let $n_k > 0$ and $m_k \in ]S_{k-1}^{3/2} n_k, S_k^{3/2} n_k[$, for some $k \in \{1,2,\ldots,N\}$. Then, there exists on $]S_{k-1}, S_k[$ a unique non-negative continuous function $f_a$ given by (3.4) with [C.1], [C.2] or [C.3] and such that

$$\int_{S_{k-1}}^{S_k} f_a(S)\mathrm{d}S = n_k, \qquad \int_{S_{k-1}}^{S_k} S^{3/2} f_a(S)\mathrm{d}S = m_k. \tag{3.5}$$

The function's parameters are given by:

- If $S_{k-1}^{3/2} < \dfrac{m_k}{n_k} < \mu_{inf}^{(k)}$, then $S_a^{(k)} = S_{k-1}$, $\beta_k = 0$ and $\sqrt{S_b^{(k)}}$ is the root in $]\sqrt{S_{k-1}}, \sqrt{S_k}[$ of

$$\begin{aligned} P_k(X) = {} & 2X^5 + 4R_{k-1}X^4 + 6R_{k-1}^2 X^3 + \left(8R_{k-1}^3 - \frac{35m_k}{4n_k}\right) X^2 \\ & + \left(10R_{k-1}^3 - \frac{35m_k}{2n_k}\right) R_{k-1} X + \left(5R_{k-1}^3 - \frac{35m_k}{4n_k}\right) R_{k-1}^2 \end{aligned} \tag{3.6}$$

  and

$$\alpha_k = \frac{2n_k}{S_b^{(k)} - S_{k-1}}. \tag{3.7}$$

- If $\mu_{inf}^{(k)} \leq \dfrac{m_k}{n_k} \leq \mu_{sup}^{(k)}$, then $S_a^{(k)} = S_{k-1}$, $S_b^{(k)} = S_k$ and

$$\alpha_k = \frac{2\left[\mu_{sup}^{(k)} n_k - m_k\right]}{\Delta S_k \left[\mu_{sup}^{(k)} - \mu_{inf}^{(k)}\right]}, \qquad \beta_k = \frac{2\left[m_k - \mu_{inf}^{(k)} n_k\right]}{\Delta S_k \left[\mu_{sup}^{(k)} - \mu_{inf}^{(k)}\right]}. \tag{3.8}$$

- If $\mu_{sup}^{(k)} < \dfrac{m_k}{n_k} < S_k^{3/2}$, then $S_b^{(k)} = S_k$, $\alpha_k = 0$ and $\sqrt{S_a^{(k)}}$ is the root in $]\sqrt{S_{k-1}}, \sqrt{S_k}[$ of

$$\begin{aligned} Q_k(X) = {} & 2X^5 + 4R_k X^4 + 6R_k^2 X^3 + \left(8R_k^3 - \frac{35m_k}{4n_k}\right) X^2 \\ & + \left(10R_k^3 - \frac{35m_k}{2n_k}\right) R_k X + \left(5R_k^3 - \frac{35m_k}{4n_k}\right) R_k^2 \end{aligned} \tag{3.9}$$

  and

$$\beta_k = \frac{2n_k}{S_k - S_a^{(k)}}. \tag{3.10}$$

*Proof.* If such a function $f_a$ exists, then the constraints (3.5) can be written

$$n_k = \frac{\alpha_k+\beta_k}{2}(S_b^{(k)}-S_a^{(k)}), \qquad m_k = \alpha_k \int_{S_a^{(k)}}^{S_b^{(k)}} \frac{S_b^{(k)}-S}{S_b^{(k)}-S_a^{(k)}} S^{3/2}\mathrm{d}S + \beta_k \int_{S_a^{(k)}}^{S_b^{(k)}} \frac{S-S_a^{(k)}}{S_b^{(k)}-S_a^{(k)}} S^{3/2}\mathrm{d}S.$$

In the case [C.2], the resolution of this system on $\alpha_k$ and $\beta_k$ gives (3.8) and they are non-negative if and only if $\mu_{inf}^{(k)} \leq \frac{m_k}{n_k} \leq \mu_{sup}^{(k)}$. In the case [C.1], $S_b^{(k)}$ has to be such that

$$\frac{m_k}{n_k} = g(S_b^{(k)}), \qquad g(x) = \frac{\int_{S_{k-1}}^{x}(x-S)S^{3/2}\mathrm{d}S}{\int_{S_{k-1}}^{x}(x-S)\mathrm{d}S} = \frac{2}{(x-S_{k-1})^2}\int_{S_{k-1}}^{x}(x-S)S^{3/2}\mathrm{d}S$$

and the ratio $\frac{m_k}{n_k}$ is smaller than $\mu_{inf}^{(k)} = g(S_k)$ since the function $g$ is an increasing function on $]S_{k-1},+\infty[$. Let us denote $R_b = \sqrt{S_b^{(k)}}$, $R_{k-1} = \sqrt{S_{k-1}}$, $R_k = \sqrt{S_k}$. Dividing by $(R_b - R_{k-1})^2$, it leads to:

$$\frac{m_k}{n_k} = \frac{4}{35(R_b+R_{k-1})^2}\left(2{R_b}^5 + 4R_{k-1}{R_b}^4 + 6R_{k-1}^2{R_b}^3 + 8R_{k-1}^3{R_b}^2 + 10R_{k-1}^4R_b + 5R_{k-1}^5\right).$$

It is then easy to show that $R_b$ should be a root of the polynomial function defined by (3.6). Moreover, let us remark that:

$$P_k(R_{k-1}) = 35R_{k-1}^2\left(R_{k-1}^3 - \frac{m_k}{n_k}\right) < 0,$$
$$P_k(R_k) = \frac{35}{4(R_k-R_{k-1})^2}\Delta S_k^2\left[\mu_{inf}^{(k)} - \frac{m_k}{n_k}\right] > 0.$$

Then $P_k$ has at least one root on $]S_{k-1},S_k[$. Moreover, using Descartes' rule of signs, we show that $P_k$ has at most one positive root since the coefficients are either positive or of the same sign as $\frac{32}{35}R_{k-1}^3 - \frac{m_k}{n_k}$ or to $\frac{20}{35}R_{k-1}^3 - \frac{m_k}{n_k}$ for the two last ones.
The last case is similar to the previous one. Indeed, for [C.3], one necessarily has $\frac{m_k}{n_k} > \mu_{sup}^{(k)}\left(>\frac{2}{7}R_k^3\right)$ and $R_a = \sqrt{S_a^{(k)}}$ is a root of $Q_k$. Moreover, $Q_k$ has only one root in $]R_{k-1},R_k[$ since $Q_k(R_{k-1}) < 0$, $Q_k(R_k) > 0$ and thanks to Descartes' rule of signs. □

Let us denotes:

$$S_{m,k} = \frac{1}{2}\left(35\frac{m_k}{n_k}\right)^{2/3}$$

One can remark that, in the case [C.1], $P(\sqrt{S_{m,k}}) > 0$, meaning that $S_b^{(k)} < S_{m,k}$. This allows to treat easily the last section in the case $S_{max} = +\infty$, which is a great advantage over the OSM method.

14

Moreover, a root of a polynomial has to be computed in cases [C.1] and [C.3]. Numerically, the second order modified Mueller method [5] is used to compute it. It usually requires between 5 and 9 evaluations of the polynomial to obtain an error smaller than $10^{-4}$ on $\sqrt{S_a^{(k)}/S_{max}}$ or $\sqrt{S_b^{(k)}/S_{max}}$. It is the heaviest part of the inversion but it occurs generally for a small number of sections as experimented and seen through the following result for narrow enough sections.

**Proposition 3.2.** Let $f$ be a $C^2$ function on $[S_{k-1},S_k]$ and $n_k$ and $m_k$ be its moments of order 0 and 3/2. Then $\mu_{inf}^{(k)} \leq \dfrac{m_k}{n_k} \leq \mu_{sup}^{(k)}$ as soon as $\Delta S_k \|f'\|_\infty + \frac{7}{12}\Delta S_k^2 \|f''\|_\infty \leq f(S_{k-1})$, where $\|.\|_\infty$ is the norm of $L_\infty(S_{k-1},S_k)$.

*Proof.* Let us compute the following ratio:

$$\mathcal{R} = \frac{2}{\mu_{sup}^{(k)} - \mu_{inf}^{(k)}} \left[ \frac{m_k}{n_k} - \frac{\mu_{inf}^{(k)} + \mu_{sup}^{(k)}}{2} \right] = \Delta S_k \frac{\int_{S_{k-1}}^{S_k} f(S) \left[ S^{\frac{3}{2}} \Delta S_k - \int_{S_{k-1}}^{S_k} \sigma^{\frac{3}{2}} \mathrm{d}\sigma \right] \mathrm{d}S}{\int_{S_{k-1}}^{S_k} f(S) \mathrm{d}S \int_{S_{k-1}}^{S_k} (2\sigma - S_k - S_{k-1}) \sigma^{\frac{3}{2}} \mathrm{d}\sigma}.$$

Then, denoting $d_2(S) = f(S) - f(S_{k-1}) - (S - S_{k-1}) f'(S_{k-1})$ :

$$\begin{aligned} |\mathcal{R}| &= \left| \frac{\int_{S_{k-1}}^{S_k} d_2(S) \left[ S^{\frac{3}{2}} \Delta S_k - \int_{S_{k-1}}^{S_k} \sigma^{\frac{3}{2}} \mathrm{d}\sigma \right] \mathrm{d}S + \int_{S_{k-1}}^{S_k} (S - S_{k-1}) f'(S_{k-1}) \left[ S^{\frac{3}{2}} \Delta S_k - \int_{S_{k-1}}^{S_k} \sigma^{\frac{3}{2}} \mathrm{d}\sigma \right] \mathrm{d}S}{\frac{1}{\Delta S_k} \left[ \Delta S_k f(S_{k-1}) + \int_{S_{k-1}}^{S_k} (f(S) - f(S_{k-1})) \mathrm{d}S \right] \int_{S_{k-1}}^{S_k} (2\sigma - S_k - S_{k-1}) \sigma^{\frac{3}{2}} \mathrm{d}\sigma} \right| \\ &\leq \frac{\|f''\|_\infty \delta_2 + \|f'\|_\infty |\delta_1|}{f(S_{k-1}) - \frac{\Delta S_k}{2} \|f'\|_\infty}, \end{aligned}$$

as soon as $f(S_{k-1}) > \frac{\Delta S_k}{2} \|f'\|_\infty$ and with

$$\delta_1 = \frac{\int_{S_{k-1}}^{S_k} (S - S_{k-1}) \left[ S^{\frac{3}{2}} \Delta S_k - \int_{S_{k-1}}^{S_k} \sigma^{\frac{3}{2}} \mathrm{d}\sigma \right] \mathrm{d}S}{\int_{S_{k-1}}^{S_k} (2\sigma - S_k - S_{k-1}) \sigma^{\frac{3}{2}} \mathrm{d}\sigma} = \frac{\Delta S_k}{2}$$

and

$$\delta_2 = \frac{\int_{S_{k-1}}^{S_k} \frac{(S - S_{k-1})^2}{2} \left| S^{\frac{3}{2}} \Delta S_k - \int_{S_{k-1}}^{S_k} \sigma^{\frac{3}{2}} \mathrm{d}\sigma \right| \mathrm{d}S}{\int_{S_{k-1}}^{S_k} (2\sigma - S_k - S_{k-1}) \sigma^{\frac{3}{2}} \mathrm{d}\sigma} \leq \frac{\frac{\Delta S_k^3}{6} \left( -S_{k-1}^{\frac{3}{2}} \Delta S_k + \int_{S_{k-1}}^{S_k} \sigma^{\frac{3}{2}} \mathrm{d}\sigma \right)}{\int_{S_{k-1}}^{S_k} (2\sigma - S_k - S_{k-1}) \sigma^{\frac{3}{2}} \mathrm{d}\sigma}$$

Introducing $R_{k-1} = \sqrt{S}_{k-1}$ and $R_k = \sqrt{S}_k$ and after some algebra:

$$\delta_2 \leq \frac{7}{12} \Delta S_k^2 \, \frac{2R_k^4 + 6R_k^3 R_{k-1} + 10R_k^2 R_{k-1}^2 + 9R_k R_{k-1}^3 + 3R_{k-1}^4}{3R_k^4 + 9R_k^3 R_{k-1} + 11R_k^2 R_{k-1}^2 + 9R_k R_{k-1}^3 + 3R_{k-1}^4} \leq \frac{7}{12} \Delta S_k^2.$$

If $\Delta S_k \|f'\|_\infty + \frac{7}{12}\Delta S_k^2 \|f''\|_\infty \leq f(S_{k-1})$, then $|\mathcal{R}| \leq 1$ and consequently $\mu_{inf}^{(k)} \leq \dfrac{m_k}{n_k} \leq \mu_{sup}^{(k)}$. □

This result induces that the case [C.2] will concern an increasing fraction of the sections, when their width tends to zero. Moreover, in this case, formulas for the reconstruction are analytical, whereas in the other cases, the root of a fifth order polynomial has to be computed. This could induce a lower cost of the reconstruction itself, compared to the exponential reconstruction, which will be checked in Section 3.1.5 with some examples. Let us now analyze this method as regards stability and accuracy.

### 3.1.3 Stability of the affine reconstruction

Since numerical methods will induce errors on the moments, let us analyzed the effect of such errors on the reconstruction. But instead of the moments itself, one considers the following independent variables: $n_k$ and $\mu_k = \frac{m_k}{n_k}$ for each $k$. This change allows to separate the effect of a change of level of the function from the effect of a change of the mean volume. Computation in each of the cases [C.1], [C.2] and [C.3] allows to show the following property.

**Proposition 3.3.** The piecewise affine reconstruction defined by proposition 3.1 is a $C^1$ application from the space $\{(n_k,\mu_k)_{k\in\{1,\dots,N\}} | \forall k,\, n_k \geq 0,\, \mu_k \in ]S_{k-1}^{3/2}, S_k^{3/2}[\}$ to the set of piecewise $C^1$ functions equipped with the $L_\infty$ norm. Moreover, its partial derivatives are given by:

$$\partial_{\mu_k} f_a(S) = n_k \frac{2S - S_a^{(k)} - S_b^{(k)}}{\int_{S_a^{(k)}}^{S_b^{(k)}} \sigma^{\frac{3}{2}} (2\sigma - S_a^{(k)} - S_b^{(k)}) \mathrm{d}\sigma} \mathbb{1}_{[S_a^{(k)}, S_b^{(k)}]}(S),$$

$$\partial_{n_k} f_a(S) = \begin{cases} 2\dfrac{S_b^{(k)} - S}{\left(S_b^{(k)} - S_{k-1}\right)^2} \mathbb{1}_{[S_{k-1}, S_b^{(k)}]}(S) & \text{if } \mu_k \in ]S_{k-1}^{\frac{3}{2}}, \mu_{inf}^{(k)}[, \\ \left[ 2\dfrac{S_k - S}{\Delta S_k^2} \dfrac{\mu_{sup}^{(k)} - \mu_k}{\mu_{sup}^{(k)} - \mu_{inf}^{(k)}} + 2\dfrac{S - S_{k-1}}{\Delta S_k^2} \dfrac{\mu_k - \mu_{inf}^{(k)}}{\mu_{sup}^{(k)} - \mu_{inf}^{(k)}} \right] \mathbb{1}_{[S_{k-1}, S_k]}(S) & \text{if } \mu_k \in [\mu_{inf}^{(k)}, \mu_{sup}^{(k)}], \\ 2\dfrac{S - S_a^{(k)}}{\left(S_k - S_a^{(k)}\right)^2} \mathbb{1}_{[S_a^{(k)}, S_k]}(S) & \text{if } \mu_k \in ]\mu_{sup}^{(k)}, S_k^{\frac{3}{2}}[. \end{cases}$$

Any moment of $\partial_{n_k} f_a(S)$ or $\partial_{\mu_k} f_a(S)$ is bounded, independently from $\Delta S$ (one can even remark that the moments of order 0, 1/2 or 3/2 of $\partial_{n_k} f_a(S)$ are smaller than a constant times $n_k$). This ensures the stability of the reconstruction.

### 3.1.4 Accuracy of the affine reconstruction

Since we use the reconstruction to close our equations, we can state that the closer the reconstruction is to the exact distribution, the more accurate our model will be. Here, the accuracy of the reconstruction is analyzed assuming that the values of the moments are exact. The effect of the error on the moments was analyzed in the previous section,

devoted to stability. In the asymptotic limit of a large number of sections, one has the following result.

**Theorem 3.1** (Accuracy of the piecewise affine reconstruction)**.** *Let $f$ be a $C^2$ fonction on $[0,S_{max}]$ with $S_{max}<\infty$ with a finite number of zeros. Let $n_k$ and $m_k$ be its moments of order 0 and 3/2 on $]S_{k-1},S_k[$, for $k\in\{1,2,\dots,N\}$ and $f_a$ the corresponding piecewise affine reconstruction given by the proposition 3.1. Then, $f_a$ is a second order approximation of $f$ when the maximal section width $\Delta S$ tends to zero: $\|f-f_a\|_{L^1(0,S_{max})}=O(\Delta S^2)$.*

*Proof.* In order to treat separately the case [C.2], let us denote $\mathcal{I}_2$ the set of all $k\in\{1,2,\dots,N\}$ such that the reconstruction corresponds to the case [C.2]. One also denotes $\mathcal{I}_{\Delta S}=\{S\in[0,S_{max}]\mid f(S)\leq 2\Delta S|f'(S)|+\frac{25}{12}\Delta S^2\|f''\|_{L^\infty(0,S_{max})}\}$ in such a way that $\cup_{k\notin\mathcal{I}_2}[S_{k-1},S_k]\subset\mathcal{I}_{\Delta S}$, thanks to the proposition 3.2. For a small enough value of $\Delta S$, $\mathcal{I}_{\Delta S}$ is a union of intervals $[a,b]$ around each zero $\lambda$ of $f$, and

$$\int_a^b|f'(x)|\mathrm{d}x=\left|\int_a^\lambda f'(x)\mathrm{d}x\right|+\left|\int_\lambda^b f'(x)\mathrm{d}x\right|=|f(a)|+|f(b)|=O(\Delta S).$$

It means that $\int_{\mathcal{I}_{\Delta S}}|f'(S)|\mathrm{d}S=O(\Delta S)$ and

$$\sum_{k\notin\mathcal{I}_2}\int_{S_{k-1}}^{S_k}f(S)\mathrm{d}S\leq\int_{\mathcal{I}_{\Delta S}}f(S)\mathrm{d}S\leq\int_{\mathcal{I}_{\Delta S}}\left(2\Delta S|f'(S)|+\frac{25}{12}\Delta S^2\|f''\|_{L^\infty(0,S_{max})}\right)\mathrm{d}S=O(\Delta S^2).$$

Moreover, since $f$ and $f_a$ have the same integrals on each section:

$$\sum_{k\notin\mathcal{I}_2}\int_{S_{k-1}}^{S_k}|f(S)-f_a(S)|\mathrm{d}S\leq 2\sum_{k\notin\mathcal{I}_2}\int_{S_{k-1}}^{S_k}f(S)\mathrm{d}S=O(\Delta S^2).$$

For $k\in\mathcal{I}_2$, the reconstruction corresponds to the case [C.2]. Let then us define the function $u$, $C^2$ on $[0,1]$, by: $u(x)=(f-f_a)(S_{k-1}+x\Delta S_k)$ for $x\in[0,1]$. One have $u''=\Delta S_k^2 f''$ since $f_a$ is affine on the entire section. Moreover, since $f$ and $f_a$ have the same moments of order 0 and $3/2$ on $]S_{k-1},S_k[$, the function $u$ is such that

$$\int_0^1 u(x)\mathrm{d}x=0,\qquad\int_0^1(S_{k-1}+x\Delta S_k)^{3/2}u(x)\mathrm{d}x=0. \tag{3.11}$$

One introduces a Taylor expansion on it, between the values $y\in[0,1]$ and $x\in[0,1]$:

$$u(x)=u(y)+(x-y)u'(y)+\frac{(x-y)^2}{2}u''(v_{x,y}),$$

with $v_{x,y}$ a value between $x$ and $y$. This expansion is introduced in (3.11) and then

$$A\begin{pmatrix}u(y)\\u'(y)\end{pmatrix}=-\frac{1}{2}\begin{pmatrix}\int_0^1(x-y)^2u''(v_{x,y})\mathrm{d}x\\\int_0^1(x-y)^2\left[(S_{k-1}+x\Delta S_k)^{3/2}-(S_{k-1}+y\Delta S_k)^{3/2}\right]u''(v_{x,y})\mathrm{d}x\end{pmatrix},$$

with

$$A=\begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2}-y \\ \alpha & \beta \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}=\int_0^1 \begin{pmatrix} 1 \\ x-y \end{pmatrix}\left[(S_{k-1}+x\Delta S_k)^{3/2}-(S_{k-1}+y\Delta S_k)^{3/2}\right]\mathrm{d}x.$$

One can then solve the system and write $u(y)$:

$$u(y)=-\frac{\beta\int_0^1(x-y)^2u''(v_{x,y})\mathrm{d}x+(y-1/2)\int_0^1(x-y)^2\left[(S_{k-1}+x\Delta S_k)^{3/2}-(S_{k-1}+y\Delta S_k)^{3/2}\right]u''(v_{x,y})\mathrm{d}x}{2\int_0^1(x-1/2)(S_{k-1}+x\Delta S_k)^{3/2}\mathrm{d}x}.$$

A majoration is then done, introducing $\gamma=S_{k-1}/dS$: $|u(y)|\leq\|u''\|_{L^\infty(0,1)}F(\gamma)$ with

$$F(\gamma)=\frac{\frac{1}{3}\int_0^1(x-y)[(\gamma+x)^{3/2}-(\gamma+y)^{3/2}]\mathrm{d}x+\frac{1}{2}\int_0^1(x-y)^2\left|(\gamma+x)^{3/2}-(\gamma+y)^{3/2}\right|\mathrm{d}x}{\int_0^1(2x-1)(\gamma+x)^{3/2}\mathrm{d}x}.$$

If $\gamma$ is not zero, then it can be written:

$$F(\gamma)=\frac{2\int_0^1(x-y)[(1+x/\gamma)^{3/2}-(1+y/\gamma)^{3/2}]\mathrm{d}x+3\int_0^1(x-y)^2\left|(1+x/\gamma)^{3/2}-(1+y/\gamma)^{3/2}\right|\mathrm{d}x}{6\int_0^1(2x-1)[(1+x/\gamma)^{3/2}-1]\mathrm{d}x}.$$

Then, $F$ is a continuous function of $\gamma$ defined on $\mathbb{R}^+$ and bounded since it tends to the following constant, when $\gamma$ tends to infinity:

$$F(\gamma)\to 2\int_0^1(x-y)^2\mathrm{d}x+3\int_0^1|x-y|^3\mathrm{d}x\leq\frac{2}{3}+\frac{3}{4}=\frac{17}{12}.$$

Then $\|f-f_a\|_{L^\infty(S_{k-1},S_k)}\leq C\Delta S_k^2\|f''\|_{L^\infty(S_{k-1},S_k)}$, with a constant $C$ independent from $\Delta S_k$. And finally

$$\|f-f_a\|_{L^1(0,S_{max})}\leq\sum_{k\notin\mathcal{I}_2}\int_{S_{k-1}}^{S_k}|f(S)-f_a(S)|\mathrm{d}S+\sum_{k\in\mathcal{I}_2}\|f-f_a\|_{L^\infty(S_{k-1},S_k)}\Delta S_k=O(\Delta S^2).$$

□

One can remark that the second order accuracy is proven in $L_\infty$ norm in each section corresponding to case [C.2]. Moreover, the previous result is easily generalizable to the case where $f$ is equal to zero in a finite number of sub-intervals of $[0,S_{max}]$.

### 3.1.5 Numerical accuracy of the reconstructions on some test cases

The aim of this section is to compare the accuracy of the two types of TSM reconstructions and of the OSM reconstruction on various probability density functions (PDFs): their numerical order of accuracy as well as their accuracy for a small number of sections. This allows to test the quality of the closure given by the models.

Let us then introduce the following PDFs $f_0$, defined on $[0,1]$, and plotted in Figure 2:

18

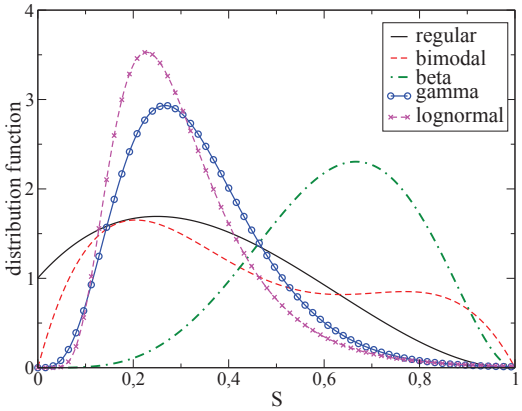


Figure 2: Model size distributions.

- a regular PDF: $f_0(S) = \dfrac{(1+8S)(1-S)^2}{I_0} \exp\left(0.001\left(1-\dfrac{1}{(1-S)^2}\right)\right)$ with $I_0 = 0.9963$
- a bimodal PDF, defined as a sum of two beta PDFs: $f_0(S) = 10\left[2S(1-S)^4 + S^4(1-S)\right]$
- a beta PDF: $f_0(S) = 105\left[S^4(1-S)^2\right]$
- a gamma PDF: $f_0(S) = \dfrac{15^5}{\Gamma(5) I_0} S^4 \exp(-15S)$ with $I_0 = 0.9991$
- a lognormal PDF: $f_0(S) = \dfrac{1}{I_0 S\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\dfrac{(\log(S)-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)$ with $I_0 = 0.9977$, $\sigma = 0.45$ and $\mu = -1.2777$.

One computes moments of order 0 and 3/2 of $f_0$ on each interval of a regular discretization of $[0,1]$ in $N$ sections. The section width is then $\Delta S = 1/N$. From these moments, the affine reconstruction and the exponential one are computed and compared with the original function $f_0$. An example of such kind of comparison is given in Figure 3, for the bimodal PDF, with 4 and 8 sections. The corresponding $L^\infty$ norm of the difference between $f_0$ and its reconstruction, depending of the section width, is then plotted in Figure 4 for the two types of reconstruction. The second order of accuracy of the affine reconstruction is observed. It is a stronger result than the one shown in theorem 3.1, since $L_1$ norm was considered in this theoretical result, or $L_\infty$ one but for the sections where an affine reconstruction is possible in the "complete" section (case [C.2]). It is interesting since the evaporation induces the use of pointwise values of the reconstruction. Moreover, the case [C.2] is the most usual: the cases [C.1] and [C.3] only appear for at most 3 sections for the bimodal, beta and gamma PDFs and on a decreasing proportion of the sections for the lognormal and regular PDFs, up to 0.2% or 0.5% of the total number of

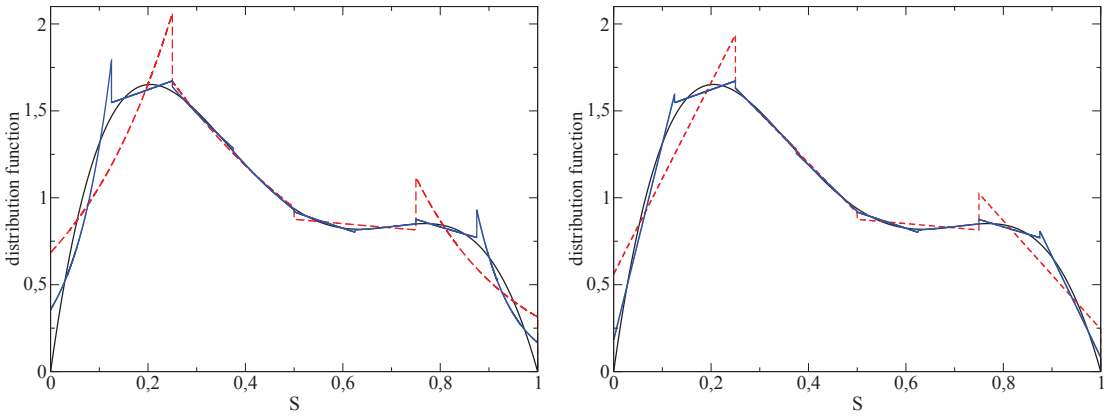


Figure 3: Bimodal distribution (black line) and its exponential (left) and affine (right) reconstructions with 4 (red dashed line) and 8 (blue solid line) sections.

sections for the most discretized case. For the exponential reconstruction, there is a reduction of the order of accuracy for the bimodal and the beta PDFs. This is due to the loss of accuracy of the computation of the parameter $b$ when $|b|$ is large enough and to the limitation of this parameter for the computation. Indeed, the limitation occurs in a small number of sections (about 0.1%) but $|b|$ is larger than 200 in about 1% of the sections and larger than 100 in about 2%. Moreover, one can also remark that the accuracy of the affine reconstruction is higher than the exponential one in all tested cases and is high even with a small number of sections. For example, the error is about 1% for 16 sections with the regular PDF. Concerning the computation cost, the affine reconstruction is usually more than twice as fast as the exponential one.

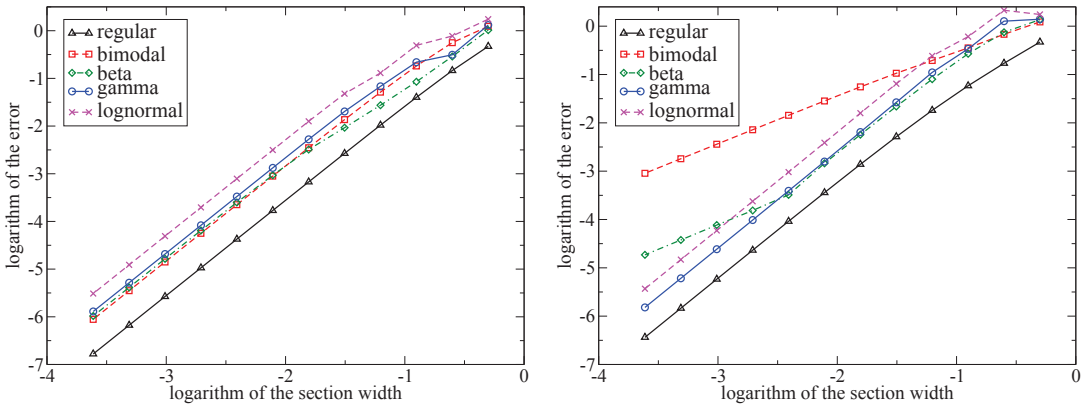


Figure 4: $L_\infty$ norm of the error for the affine (left) and the exponential (right) reconstructions.

### 3.2 Velocity reconstruction

In the previous works [9,24,25], a constant velocity was always considered in the section, except in [38]: $\chi_k(S) = u_k$. This leads to: $\mathcal{U}_2^{(k)} = u_k \otimes u_k$, $\mathcal{E}_u^{(k-\frac{1}{2})} = \mathcal{E}^{(k-\frac{1}{2})} u_k$, $\mathcal{M}_u^{(k)} = \mathcal{M}^{(k)} u_k$,

$$F^{(k)} = \frac{\boldsymbol{u_g} - u_k}{\overline{\mathrm{St}}}, \qquad \frac{1}{\overline{\mathrm{St}}} = \frac{\int_{\phi_{k-1}}^{\phi_k} \frac{V(\phi)}{\mathrm{St}(\phi)} \kappa_k(\phi) \mathrm{d}\phi}{\int_{\phi_{k-1}}^{\phi_k} V(\phi) \kappa_k(\phi) \mathrm{d}\phi}$$

and $Q_{ijk}^{3*} = Q_{ijk}^{2*} u_i$,

$$\begin{pmatrix} Q_{ijk}^1 \\ Q_{ijk}^{2*} \end{pmatrix} = |u_i - u_j| \iint_{\mathcal{D}_{ijk}} \begin{pmatrix} 1 \\ (r^*)^3 \end{pmatrix} \kappa_i(r^*) \kappa_j(r^\diamond) \beta(r^*, r^\diamond) \mathrm{d}r^* \mathrm{d}r^\diamond. \tag{3.12}$$

To increase the accuracy on the description of velocities as conditioned by size, a velocity distribution that is polynomial in size was considered in the sections in [38], at the cost of transporting extra size-velocity crossed-moments. Here, we test a MUSCL type reconstructions to increase the accuracy with a smaller increase of cost. The size conditioned velocity is written as a function of surface and reads:

$$\boldsymbol{u_d}(S) = \sum_{k=1}^{N} \chi_k(S) \mathbb{1}_{[S_{k-1}, S_k]}(S), \qquad \chi_k(S) = u_k + \gamma^{(k)} (S - S_{\mathrm{avg}}^{(k)}). \tag{3.13}$$

The parameter $S_{\mathrm{avg}}^{(k)}$ is chosen such that $m_k u_k = \int_{S_{k-1}}^{S_k} S^{3/2} \chi_k(S) \kappa_k(S) \mathrm{d}S$ and the slope $\gamma^{(k)}$ is computed thanks to a minmod limiter:

$$S_{\mathrm{avg}}^{(k)} = \frac{\int_{S_{k-1}}^{S_k} S^{5/2} \kappa_k(S) \mathrm{d}S}{\int_{S_{k-1}}^{S_k} S^{3/2} \kappa_k(S) \mathrm{d}S} \in ]S_{k-1}, S_k[, \qquad \gamma^{(k)} = \mathrm{minmod}\left( \frac{u_{k+1} - u_k}{S_{\mathrm{avg}}^{(k+1)} - S_{\mathrm{avg}}^{(k)}}, \frac{u_k - u_{k-1}}{S_{\mathrm{avg}}^{(k)} - S_{\mathrm{avg}}^{(k-1)}} \right).$$

Let us remark that for the affine TSM, $S_{\mathrm{avg}}^{(k)}$ can be written as a rational function of $\sqrt{S_a^{(k)}}$ and $\sqrt{S_b^{(k)}}$, whereas its analytical expression is more complex for the exponential TSM. In all cases, this velocity reconstruction should give us a second order reconstruction of the velocity, as a function of the droplet surface.

### 3.3 Conclusion on the reconstructions

At this point, the system (2.8-2.10) is closed by a reconstruction of the size distribution $\kappa_k$ and of the velocity $\chi_k$ from the moments $n_k$, $m_k$ and $m_k u_k$. Considering the size distribution, the affine reconstruction introduced in this paper is shown to be stable and second order accurate in all cases and not only in the case [C.2] where the reconstruction linearly depends on the moments. Moreover, its cost is twice as low as the exponential

reconstruction and its accuracy is better on tested cases. Finally, its simple shape makes the source term computation easier. Concerning the velocity, an affine reconstruction is proposed, instead of the usually used constant one, in order to improve the description of this quantity inside the section.

The system (2.8-2.10) has now to be solved numerically under the constraint of preserving the realizability of the moments in each section. To do so a splitting strategy is used. Then dedicated schemes are developed separately for each operator. Since transport schemes were already developed in [10,38], one focus on evaporation and drag and on coalescence.

## 4 Scheme for evaporation and drag

The system corresponding to evaporation and drag is the following ODE system:

$$\mathrm{d}_t n_k = \mathcal{K}\kappa_{k+1}(t,S_k) - \mathcal{K}\kappa_k(t,S_{k-1}), \tag{4.1}$$

$$\mathrm{d}_t m_k = \mathcal{K}S_k^{3/2}\kappa_{k+1}(t,S_k) - \mathcal{K}S_{k-1}^{3/2}\kappa_k(t,S_{k-1}) - \frac{3}{2}\int_{S_{k-1}}^{S_k}\sqrt{S}\mathcal{K}\kappa_k(t,S)\mathrm{d}S, \tag{4.2}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{d}_t(m_k u_k) = {} & \mathcal{K}S_k^{3/2}\kappa_{k+1}(t,S_k)\chi_{k+1}(t,S_k) - \mathcal{K}S_{k-1}^{3/2}\kappa_k(t,S_{k-1})\chi_k(t,S_{k-1}) \\ & -\frac{3}{2}\int_{S_{k-1}}^{S_k}\sqrt{S}\mathcal{K}\kappa_k(t,S)\chi_k(t,S)\mathrm{d}S + \int_{S_{k-1}}^{S_k}\sqrt{S}\frac{\boldsymbol{u_g}-\chi_k(S)}{\mathcal{A}}\mathrm{d}S,\end{aligned} \tag{4.3}$$

where $\mathcal{K} = \mathcal{K}_S$ is the constant evaporation rate and $\mathcal{A} = \mathrm{St}(S)/S$ is a constant for the considered Stokes drag force. In fact, one have one ODE system for each point $x$ (or each cell of the mesh in the spatially discretized version). But, since these systems are independent, the spatial dependence is skipped for the sake of simplicity and without any loss of generality.

We will first deal with the two first equations, corresponding to the pure evaporating case, since they are independent of the velocity, here. Let us first remark that directly using on this system an explicit Euler scheme, or any explicit SSP Runge-Kutta method, may return non-realizable moments and will not be robust, as shown in Appendix B. Various realizable schemes can be used. When considering integer moments, a kinetic scheme was introduced in [23] for the constant evaporation law. Another robust scheme is developed in [27] for high order moment methods for eventually non-constant evaporation rate. In the following, this last scheme is referred to as the "quadrature kinetic scheme" since we show that it can be interpreted as a quadrature of the kinetic scheme's formulae. Here, in our context of fractional moment method, the kinetic scheme is first adapted. Then, the quadrature kinetic scheme and a simplified version of it are developed and numerically tested. Finally, the quadrature kinetic scheme is extended to the additional consideration of the drag force.

22

## 4.1 Case with evaporation alone

### 4.1.1 Kinetic scheme (KS) for the evaporating case

The system (4.1-4.2) is related to the following kinetic equation on the droplet distribution $n(t,S)=\int f(t,\boldsymbol{u},S)\mathrm{d}\boldsymbol{u}$:

$$\partial_t n-\partial_S(\mathcal{K}n)=0. \tag{4.4}$$

This kinetic equation has the following analytical solution: $n(t,S)=n(0,S+\mathcal{K}t)$. Let us denotes $n_k^n$ and $m_k^n$ some approximation of the moments of order 0 and 3/2 of $n(t^n,.)$ on the section $[S_{k-1},S_k]$. Then, a kinetic scheme (KS) is defined which consists in solving exactly (4.4) on a time step, from a reconstruction $\sum_{k=1}^N \kappa_k^n(S)\mathbb{1}_{[S_{k-1},S_k]}(S)$ of the NDF corresponding to the moments $n_k^n$ and $m_k^n$ and in taking its moments. With the CFL-like condition $\mathcal{K}\Delta t\leq\Delta S_k$ and with the convention $\kappa_{N+1}^n=0$, we get:

$$n_k^{n+1}=\int_{S_{k-1}+\mathcal{K}\Delta t}^{S_k}\kappa_k^n(S)\mathrm{d}S+\int_{S_k}^{S_k+\mathcal{K}\Delta t}\kappa_{k+1}^n(S)\mathrm{d}S \tag{4.5}$$

$$m_k^{n+1}=\int_{S_{k-1}+\mathcal{K}\Delta t}^{S_k}(S-\mathcal{K}\Delta t)^{3/2}\kappa_k^n(S)\mathrm{d}S+\int_{S_k}^{S_k+\mathcal{K}\Delta t}(S-\mathcal{K}\Delta t)^{3/2}\kappa_{k+1}^n(S)\mathrm{d}S \tag{4.6}$$

This can be rewritten, for $k>1$, in such a way that some flux terms appear:

$$n_k^{n+1}=n_k^n-\int_{S_{k-1}}^{S_{k-1}+\mathcal{K}\Delta t}\kappa_k^n(S)\mathrm{d}S+\int_{S_k}^{S_k+\mathcal{K}\Delta t}\kappa_{k+1}^n(S)\mathrm{d}S \tag{4.7}$$

$$\begin{aligned}m_k^{n+1}=&m_k^n+\int_{S_{k-1}}^{S_k}\left[(S-\mathcal{K}\Delta t)^{3/2}-S^{3/2}\right]\kappa_k^n(S)\mathrm{d}S\\&-\int_{S_{k-1}}^{S_{k-1}+\mathcal{K}\Delta t}(S-\mathcal{K}\Delta t)^{3/2}\kappa_k^n(S)\mathrm{d}S+\int_{S_k}^{S_k+\mathcal{K}\Delta t}(S-\mathcal{K}\Delta t)^{3/2}\kappa_{k+1}^n(S)\mathrm{d}S\end{aligned} \tag{4.8}$$

This scheme, applied to the use of two integer moments, was analyzed in [23]: with the use of an affine reconstruction on the complete section (corresponding to case [C.2] here), the scheme was shown to be second order accurate. Here, thanks to Theorem 3.1, it can be shown easily, and in all cases, that the scheme is second order consistent in $L^1$ norm (and in $L^\infty$ norm for sections in case [C.2]). Proposition 3.3 induces its stability.

This kinetic scheme then highly accurate, due to the fact that the kinetic equation is solved exactly during the time step. However, it can be not easily generalized to non constant evaporation laws. It is the reason of the development of simplified schemes.

### 4.1.2 Quadrature kinetic scheme (QKS) for the evaporating case

The scheme presented in [27] is derived for a system of moments $M_{i,k}=\int_{S_{k-1}}^{S_k}S^i f(S)\mathrm{d}S$, with $i=0,1,\ldots,2N_m-1$ on each section $k$. It is seen as a 3-step method:

1. A distribution $f^n$ is reconstructed from the moments $(M_{k,i}^n)_{i=0,\ldots,2N_m-1,k=1,\ldots,N}$ at $t=t^n$ in order to compute the "fluxes", $\Phi_{k,i}^n=\int_{S_{k-1}}^{S_{k-1}+\mathcal{K}\Delta t}S^i f^n(S)\mathrm{d}S$

2. For each $k=1,\dots,N$, the $N_m$ weights $w_{k,\alpha}$ and abscissas $\sigma_{k,\alpha}$, corresponding to the quadrature of the moment vector $(M_{k,i}-\Phi^n_{k,i}+\Phi^n_{k+1,i})_{i=0,\dots,2N_m-1}$ and then to the measure $f^n(S)\mathbb{1}_{]S_{k-1}+\mathcal{K}\Delta t,S_k+\mathcal{K}\Delta t[}(S)\mathrm{d}S$, are computed.

3. The moments $(M^{n+1}_{k,i})_{i=0,\dots,2N_m-1}$ corresponding to the weights $w_{k,\alpha}$ and the abscissas $\sigma_{k,\alpha}-\mathcal{K}\Delta t$ are computed: $M^{n+1}_{k,i}=\sum_{\alpha=1}^{N_m} w_{k,\alpha}(\sigma_{k,\alpha}-\mathcal{K}\Delta t)^i$.

In fact, this can be seen as a quadrature formula of the kinetic scheme given by:

$$M^{n+1}_{k,i}=\int_{S_{k-1}}^{S_k} S^i f^n(S+\mathcal{K}\Delta t)\mathrm{d}S=\int_{S_{k-1}+\mathcal{K}\Delta t}^{S_k+\mathcal{K}\Delta t}(S-\mathcal{K}\Delta t)^i f^n(S)\mathrm{d}S.$$

Let us remark that since only integer moments are considered, the scheme is identical to the kinetic one, no erreor being introduced by the quadrature. Moreover, this interpretation of the scheme as a quadrature formula on the kinetic scheme is still valid for the case of size dependant evaporation coefficient $\mathcal{K}$, but the use of the quadrature then induces an additional error compared to the kinetic scheme.

Here, the moments of order 0 and 3/2 are used. Quadrature formulas are used on the kinetic scheme (4.5-4.6). But, here, the interval $]S_{k-1}+\mathcal{K}\Delta t,S_k+\mathcal{K}\Delta t[$ is divided into the two following intervals $]S_{k-1}+\mathcal{K}\Delta t,S_k[$ and $]S_k,S_k+\mathcal{K}\Delta t[$ and the quadrature is done on each one. This sub-division is relevant for the global problem, including the drag force or a more complex evaporation rate. Indeed, since each section has its own velocity and could have its own evaporation rate as in [34], it will be interesting to consider separately the droplets coming from their respective sections. Moreover, to obtain a good approximation, while still conserving the moment of order 3/2, we use two quadrature points and moments of order 0, 1/2, 1, 3/2, these moments being computed analytically. It can be seen as a classical two-point quadrature on the measure obtained by the change of variable $R=\sqrt{S}$. An analytical formula can then be used [7]. Let us then denote $(w_1,w_2)$ and $(\sqrt{\sigma_1},\sqrt{\sigma_2})$ the quadrature points of $2R\kappa^n_k(R^2)\mathbb{1}_{]S_{k-1}+\mathcal{K}\Delta t,S_k[}(R^2)\mathrm{d}R$ and $(\tilde{w}_1,\tilde{w}_2)$ and $(\sqrt{\tilde{\sigma}_1},\sqrt{\tilde{\sigma}_2})$ the quadrature points of $2R\kappa^n_{k+1}(R^2)\mathbb{1}_{]S_k,S_k+\mathcal{K}\Delta t[}(R^2)\mathrm{d}R$. They are then such that:

$$\int_{S_{k-1}+\mathcal{K}\Delta t}^{S_k} S^{j/2}\kappa^n_k(S)\mathrm{d}S=\sum_{i=1}^{2} w_i(\sigma^0_i)^{j/2}\quad \int_{S_k}^{S_k+\mathcal{K}\Delta t} S^{j/2}\kappa^n_k(S)\mathrm{d}S=\sum_{i=1}^{2}\tilde{w}_i(\tilde{\sigma}^0_i)^{j/2}\quad j\in\{0,1,2,3\}. \tag{4.9}$$

Then, the update values of the moments are:

$$\begin{aligned} n^{n+1}_k&=\sum_{i=1}^{2} w_i+\sum_{i=1}^{2}\tilde{w}_i,\\ m^{n+1}_k&=\sum_{i=1}^{2} w_i(\sigma_i-\mathcal{K}\Delta t)^{3/2}+\sum_{i=1}^{2}\tilde{w}_i(\tilde{\sigma}_i-\mathcal{K}\Delta t)^{3/2}. \end{aligned}$$

Compared to the kinetic scheme, an additional error comes from the use of the quadrature for integration of some function $g$ on the measure described above. Since the support

widths of the measures are smaller than $\Delta S_k/(R_k+R_{k-1})$, this error will behave at most as $O(\Delta S_k^4/(R_k+R_{k-1})^4)$ as soon as the function $g$ is $C^4$, its fourth order derivative appearing in the bound. However, for the mass density, $g(x)=(x^2-\mathcal{K}\Delta t)^{3/2}$ and $g^{(4)}(x)$ is singular at $x=\sqrt{\mathcal{K}\Delta t}$. This means that some accuracy will be lost in the first section.

### 4.1.3 Simplified quadrature kinetic scheme (SQKS) for the evaporating case

For practical applications, a still simpler algorithm can be needed to reduce the cost, using a "quadrature" with only one point, i.e. a mean surface. This can be done directly on the moments of order 0 and 3/2. Then, one compute the values of the moments of order 0 and 3/2 on each of the separated intervals $]S_{k-1}+\mathcal{K}\Delta t,S_k[$ and $]S_k,S_k+\mathcal{K}\Delta t[$ and we deduce the value of a mean surfaces $\sigma$ and $\tilde{\sigma}$:

$$n_m=\int_{S_{k-1}+\mathcal{K}\Delta t}^{S_k}\kappa_k^n(S)\mathrm{d}S, \qquad n_m\sigma^{3/2}=\int_{S_{k-1}+\mathcal{K}\Delta t}^{S_k}S^{3/2}\kappa_k^n(S)\mathrm{d}S,$$
$$\tilde{n}_m=\int_{S_k}^{S_k+\mathcal{K}\Delta t}\kappa_{k+1}^n(S)\mathrm{d}S, \qquad \tilde{n}_m\tilde{\sigma}^{3/2}=\int_{S_k}^{S_k+\mathcal{K}\Delta t}S^{3/2}\kappa_{k+1}^n(S)\mathrm{d}S.$$

The update values of the moments are then:

$$n_k^{n+1}=n_m+\tilde{n}_m,$$
$$m_k^{n+1}=n_m(\sigma-\mathcal{K}\Delta t)^{3/2}+\tilde{n}_m(\tilde{\sigma}-\mathcal{K}\Delta t)^{3/2}.$$

Here, compared to the kinetic scheme, the additional error coming from the quadrature is now dominant. Indeed, it leads to an error behaving as $O(\Delta S^2)$ and then to a global first order consistency error.

### 4.1.4 Results on the purely evaporating case

To compare the schemes, the purely evaporating problem with a dimensionless evaporation rate $\mathcal{K}=1$ is resolved using the initial dimensionless distributions defined in section 3.1.5. More precisely, the regular and the bimodal distributions are used since they offer a different behavior in terms of accuracy of the affine and exponential reconstructions, as shown above. A uniform discretization in $S$ on $[0,1]$ is used and the CFL-like condition is fixed such that $\mathcal{K}\Delta t/\Delta S=0.8$. Computations are done from $t=0$ to the end of the evaporation, $t=1$, with the different kinds of schemes (KS, QKS and SQKS) for TSM with the affine reconstruction (aff TSM) and only KS for TSM with the exponential reconstruction (exp TSM) and for OSM, in order to assess the effect of the reconstruction.

One then compares the reconstructed distribution $f_r^n(S)$ at each time $t^n$ from the computed moments $(n_k^n,m_k^n)_k$ to the analytical solution $f(t^n,S)=f_0(S+\mathcal{K}t^n)$. Let us define the error by $\max_n\|f_r^n-f(t^n,.)\|_{L_1(0,1)}$. This error is then presented in Figure 5, as a function of the section width $\Delta S=1/N$ for a number $N$ of sections from 2 to 1024 and for the two initial distributions. As expected, the KS is second order accurate with the piecewise affine reconstruction. In fact, one would have noticed the same order of accuracy by using the

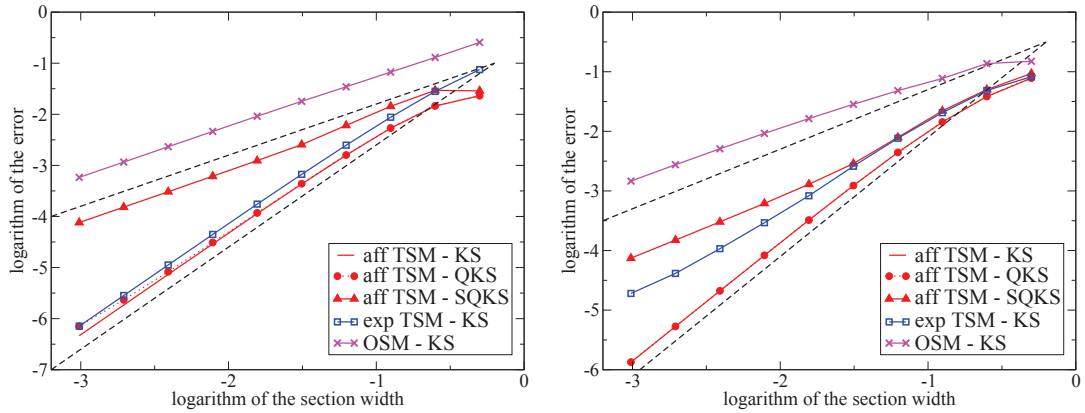


Figure 5: Purely evaporating case with the regular initial distribution (left) and the bimodal one (right): maximal value in time of the $L_1$ norm of the error on the NDF depending on the section width. Lines of slope 1 and 2 are represented by black dashed lines.

$L_\infty$ norm instead of the $L_1$ norm. With the exponential one, it is also second order accurate when considering the regular initial distribution but there is a loss of accuracy for the bimodal initial distribution, resulting from the loss of accuracy of the reconstruction in this case. The KS for OSM leads to a first order of accuracy corresponding to the first order of accuracy of the reconstruction. Concerning the other schemes, one can see that the accuracy of the QKS is really close to the one of the KS. In fact, the $L_\infty$ norm of the error on the distribution saturates with the QKS, due only to the first section: when eliminating this section in the evaluation of the error, one recovers a second order of accuracy with this norm. Finally, the SQKS is first order accurate as expected, but with an accuracy still at least ten times better than OSM with the KS. So, using TSM, even with this simplified scheme, still induces a much better accuracy for the consideration of the evaporation than OSM with the KS and twice as much sections, i.e. with the same number of size moments (but with a larger number of total variables for OSM when considering also the velocity).

Two global quantities are also considered since they are important for practical applications: the total number density $\sum_{k=1}^{N} n_k$ and the total mass density $\sum_{k=1}^{N} m_k$. The errors on these two variables, divided by their initial values, are plotted in Figure 6 for the regular initial distribution. First, one observes that KS is at least second order accurate with TSM and first order accurate with OSM. For the total mass density, it is even third order accurate. This is due to a compensation of fluxes between the sections, since their is no mass flux corresponding to disappearing droplets (i.e. no mass flux at zero size). It means that the mass density transferred to the gaseous phase is accurately described. Using TSM with the piecewise affine reconstruction, the QKS induces a loss of accuracy for the first section only visible on the total number density when more than 256 sections are used. The SQKS is second order accurate for the total mass density but only first order accurate for the total number density. However, the error induced by this scheme is

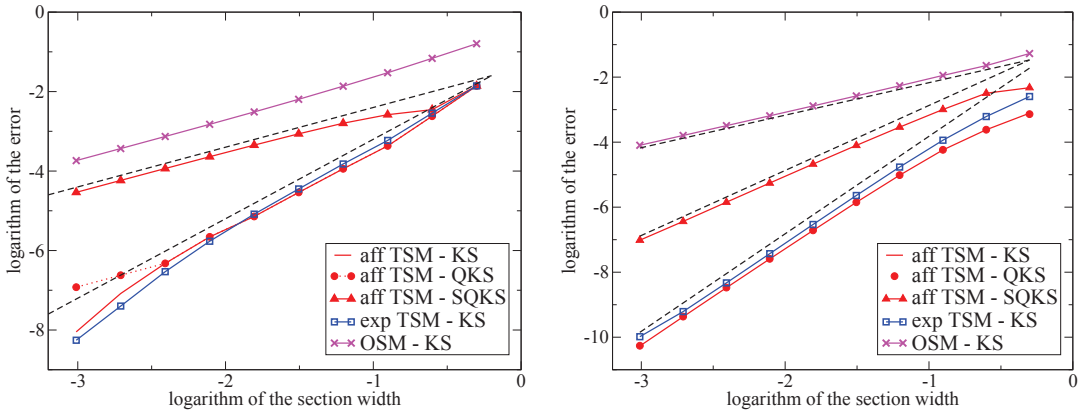


Figure 6: Purely evaporating case with the regular initial distribution: maximal value of the error, depending on the section width, on the total number (left) and on total mass (right) divided by their initial values. Lines of slope 1, 2 (left and right) and 3 (right) are represented by black dashed lines.

smaller than 1% as soon as at least 3 sections are used.

Finally, with the QKS, the affine TSM is more than two times faster than the exponentiel TSM with a better accuracy (results of QKS with the exponentiel TSM are not represented here, for the sake of clarity).

## 4.2 Case with evaporation and drag

### 4.2.1 Quadrature kinetic scheme (QKS) for evaporation and drag

In the following, we use the QKS with the affine reconstruction for their accuracy, their simplicity, and their reasonable cost. The drag force is solved together with the evaporation in the following way . First, the quadrature points $(w_i)_{i=1,2}$, $(\sigma_i^0)_{i=1,2}$ and $(\tilde{w}_i)_{i=1,2}$, $(\tilde{\sigma}_i^0)_{i=1,2}$ are defined as in section 4.1.2 by (4.9). Then, the evolution of the abscissae during the time step is given by solving the systems:

$$\begin{cases} \mathrm{d}_t\sigma_i(t) = -\mathcal{K}, \\ \sigma_i(0) = \sigma_i^0, \\ \mathrm{d}_t v_i(t) = \dfrac{\boldsymbol{u}_g - v_i(t)}{\mathcal{A}\sigma_i(t)}, \\ v_i(0) = \chi_k(\sigma_i^0), \end{cases} \qquad \begin{cases} \mathrm{d}_t\tilde{\sigma}_i(t) = -\mathcal{K}, \\ \tilde{\sigma}_i(0) = \tilde{\sigma}_i^0, \\ \mathrm{d}_t \tilde{v}_i(t) = \dfrac{\boldsymbol{u}_g - \tilde{v}_i(t)}{\mathcal{A}\tilde{\sigma}_i(t)}, \\ \tilde{v}_i(0) = \chi_{k+1}(\tilde{\sigma}_i^0). \end{cases}$$

Let us also notice that we can provide an analytical solution if the gas velocity $\boldsymbol{u}_g$ is constant. As an example for the first one, the analytical solution reads:

$$\sigma_i(t) = \sigma_i^0 - \mathcal{K}t \qquad v_i(t) = \boldsymbol{u}_g + (u_k - \boldsymbol{u}_g)\left(1 - \frac{\mathcal{K}t}{\sigma_i^0}\right)^{\frac{1}{\mathcal{K}\mathcal{A}}}.$$

The updated moment values are then:

$$n_k^{n+1} = \sum_{i=1}^{2} w_i + \sum_{i=1}^{2} \tilde{w}_i$$
$$m_k^{n+1} = \sum_{i=1}^{2} w_i (\sigma_i(\Delta t))^{3/2} + \sum_{i=1}^{2} \tilde{w}_i (\tilde{\sigma}_i(\Delta t))^{3/2}$$
$$m_k u_{k+1}^{n+1} = \sum_{i=1}^{2} w_i (\sigma_i(\Delta t))^{3/2} v_i(\Delta t) + \sum_{i=1}^{2} \tilde{w}_i (\tilde{\sigma}_i(\Delta t))^{3/2} \tilde{v}_i(\Delta t)$$

Let us remark that this scheme still corresponds to a quadrature approximation of a kinetic scheme, using the analytical solution of the kinetic equation for evaporation and drag. Moreover, the same strategy can be used to solve the drag force together with the SQKS for the evaporation.

### 4.2.2 Result for evaporation and drag

Let us consider a test case with evaporation and drag, with $\frac{1}{\mathcal{KA}} = 9.89$. As in section 4.1.4, we use the dimensionless evaporation rate $\mathcal{K} = 1$ and the regular PDF $f_0$, defined in section 4.1.4, as initial dimensionless size distributions. The mono-kinetic assumption is used for the initial condition, so that the initial NDF is:

$$f(0,S,u) = f_0(S)\delta(u - u_0(S)), \qquad u_0(S) = \boldsymbol{u_g}\left(1 + 2S^2 - \frac{4}{3}S^3 + \frac{S^4}{4}\right), \tag{4.10}$$

where $\boldsymbol{u_g} = 1$ is the gas velocity, assumed to be constant. The initial velocity profile $u_0$, represented in Figure 8-right (solid line with circles), is typical of the velocity of a spray having evolved in a decelerating gas velocity field. The analytical solution is then:

$$f(t,S,u) = f_0(S - \mathcal{K}t)\delta(u - \boldsymbol{u_d}(t,S)), \qquad \boldsymbol{u_d}(t,S) = \boldsymbol{u_g} + \left[u_0(S + \mathcal{K}t) - \boldsymbol{u_g}\right]\left(1 + \frac{\mathcal{K}t}{S}\right)^{-\frac{1}{\mathcal{KA}}}.$$

Resolution of system (4.1-4.3) is conducted using the QKS described above for OSM and for the affine TSM, with constant or affine reconstruction of the velocity. The same discretizations as in section 4.1.4 are used and only the accuracy on momentum is studied here, since the other variables were already considered in section 4.1.4.

The error on the mean velocity of the spray ($\sum m_k u_k / \sum m_k$) and on the momentum, divided by the initial value of these quantities, are given in Figure 7. All methods involving a constant velocity reconstruction in each section are first order accurate. However, the error of TSM is much lower than the one of OSM for the momentum but similar for the mean velocity due to error compensations in this case. The affine reconstruction of the velocity does not improve the error of OSM: it is the same for the momentum and it is even worse for the mean velocity. For the affine TSM, it increases the accuracy: the method is second order accurate, with a much smaller error for all the discretizations.

28

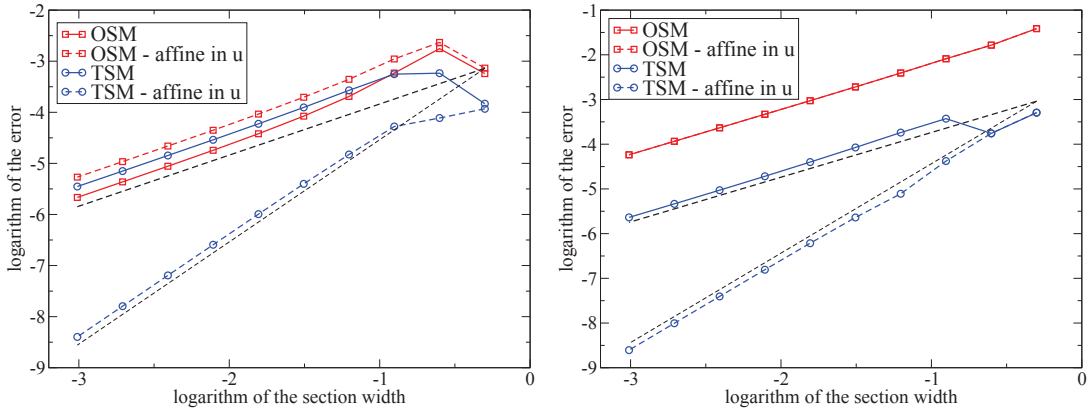


Figure 7: Case with evaporation and drag for the regular initial distribution: maximal value of the error, depending on the section width, on the mean velocity (left) and on the momentum (right), divided by their initial values. Lines of slope 1 and 2 are represented by black dashed lines.

# 5 Scheme for coalescence

The model for the purely coalescing problem is written:

$$\mathrm{d}_t \begin{pmatrix} n_k \\ m_k \\ m_k u_k \end{pmatrix} = -\frac{1}{\mathrm{Kn}} \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} \begin{pmatrix} Q^1_{kij} \\ Q^{2*}_{kij} \\ Q^{3*}_{kij} \end{pmatrix} + \frac{1}{\mathrm{Kn}} \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} \begin{pmatrix} \frac{1}{2}Q^1_{ijk} \\ Q^{2*}_{ijk} \\ Q^{3*}_{ijk} \end{pmatrix}. \tag{5.1}$$

Both cases of a constant and a linear reconstruction of the velocity in each section are considered here, in such a way that the terms $Q^1_{ijk}$, $Q^{2*}_{ijk}$ and $Q^{3*}_{ijk}$ are given by (3.12) and $Q^{3*}_{ijk} = Q^{2*}_{ijk} u_i$ or by (2.11). The complete convergence analysis of this problem, when the size width tends to zero, is out of the scope of this paper. But it will be numerically tested, after giving a numerical ODE solver able to ensure the realizability.

## 5.1 Numerical scheme

Let us first consider an explicit Euler method for this ODE system.

**Proposition 5.1** (Realizability for the explicit Euler method on the coalescing problem)**.** From a set $(n^n_k, m^n_k)_{k=1,\dots,N}$ of realizable moments and from $(u^n_k)_{k=1,\dots,N}$, one step of the explicit Euler scheme on ODE system (5.1) leads to realizable moments $(n^{n+1}_k, m^{n+1}_k)_{k=1,\dots,N}$ if

$$\Delta t \leq \frac{1}{\max_{j,k} |u^n_k - u^n_j| \max_k \int_{r^*>0} \beta(r_k, r^*) f_a(r^{*2}) 2r^* \mathrm{d}r^*} \tag{5.2}$$

where $f_a(S) = \sum_{k=1}^{N} \kappa^n_k(S) \mathbb{1}_{[S_{k-1}, S_k]}(S)$ is the reconstructed distribution from the moments $(n^n_k, m^n_k)_{k\in\{1,\dots,N\}}$.

*Proof.* Let us define $a_k^n = m_k^n - V_{k-1} n_k^n$ and $b_k^n = V_k n_k^n - m_k^n$. These variables are positive. Moreover, with the change of variable $V = S^{3/2}$ and $f^v(V)\mathrm{d}V = f_a(S)\mathrm{d}S$:

$$a_k^{n+1} = a_k^n + \frac{\Delta t}{2}\int_{V_{k-1}}^{V_k}(v-V_{k-1})\int_{v^*\in[0,v]} f^v(v-v^*)f^v(v^*)\beta(v-v^*,v^*)|\boldsymbol{u_d}(v^*)-\boldsymbol{u_d}(v-v^*)|\mathrm{d}v^*\mathrm{d}v$$
$$-\Delta t\int_{V_{k-1}}^{V_k}(v-V_{k-1})f^v(v)\int_{v^*\geq 0} f^v(v^*)\beta(v,v^*)|\boldsymbol{u_d}(v^*)-\boldsymbol{u_d}(v)|\mathrm{d}v^*\mathrm{d}v.$$

Since the velocity reconstruction $\boldsymbol{u_d}$ does not introduce values bigger of smaller than the $(u_k^n)_{k\in\{1,\dots,N\}}$, one can write:

$$\begin{aligned} a_k^{n+1} &\geq a_k^n - \Delta t \max_{j,k}|u_k^n - u_j^n|\int_{V_{k-1}}^{V_k}(v-V_{k-1})f^v(v)\int_{v^*\geq 0} f^v(v^*)\beta(v,v^*)\mathrm{d}v^*\mathrm{d}v \\ &\geq a_k^n\left[1-\Delta t\max_{j,k}|u_k^n-u_j^n|\int_{v^*\geq 0} f^v(v^*)\beta(V_k,v^*)\mathrm{d}v^*\right] \end{aligned}$$

This quantity is then positive if $\Delta t$ is limited as in (5.2). In the same way, we prove that $b_k^{n+1}$ is positive in this case, which concludes the proof. □

Then any SSP method can be applied to solve the ODE system (5.1), as soon as the time step is limited as in (5.2). We use here the third order three stage Runge-Kutta SSP method, with the same limitation (5.2) on the time step as for the explicit Euler method (see for example [16]). Let us notice that a sufficient limitation is given by

$$\Delta t \leq \frac{1}{\max_{j,k}|u_k^n-u_j^n|\pi\left[V_k^{2/3}n_{tot}^n + 2V_k^{1/3}(n_{tot}^n)^{2/3}(m_{tot}^n)^{1/3} + (n_{tot}^n)^{1/3}(m_{tot}^n)^{2/3}\right]}$$

where $n_{tot}^n = \sum_{k=1}^N n_k^n$ (which decreases with time) and $m_{tot}^n = \sum_{k=1}^N m_k^n$ (which is constant). This limitation is used for our computations.

Moreover, one has also to compute the terms $Q_{ijk}^1$, $Q_{ijk}^{2*}$ and $Q_{ijk}^{3*}$. To compute them analytically, an algorithm was given for OSM in [25], allowing a pre-calculation of part of them. It could be generalized for the affine TSM, when the velocity is considered constant in the sections, and the pre-calculation could also be done for the sections in case [C.2], i.e. for most of the sections. But when an affine reconstruction of the velocity is used in the section, this cannot be done so easily. Moreover, analytical formulas for the integrals are no more valid when realistic collision efficiencies are considered. So, here, these integrals are numerically approximated by the use of quadrature. The previous proof can still be done with these approximations, as soon as the chosen quadrature gives the exact value of integrals of $f_a(S)\mathrm{d}S$ and $S^{3/2}f_a(S)\mathrm{d}S$ on the sections. One can remark that this condition is not rigorously satisfied by the quadrature used till now for the exponential TSM: neither Gauss-Legendre quadrature nor adapted quadrature (corresponding to the measure $\kappa_k(S)\mathrm{d}S$) [9]. Realizability at the computational level is then still an open question in this case. For the affine TSM, a Gauss-Legendre quadrature in the $R$ variable is used, with at least 4 quadrature points, ensuring then the realizability of the scheme.

30

## 5.2 Results on the purely coalescing case

In order to test the accuracy of the method for the description of coalescence, let us consider a fictitious homogeneous configuration with a spray constituted of droplets initially at a velocity depending on their size, in such a way that coalescence will occur. More precisely, the Knudsen number is $\mathrm{Kn} = 0.0273$ and the initial distribution is given by (4.10), similarly to the test case on evaporation and drag (section 4.2.2), where $f_0$ is the lognormal PDF defined in section 3.1.5.

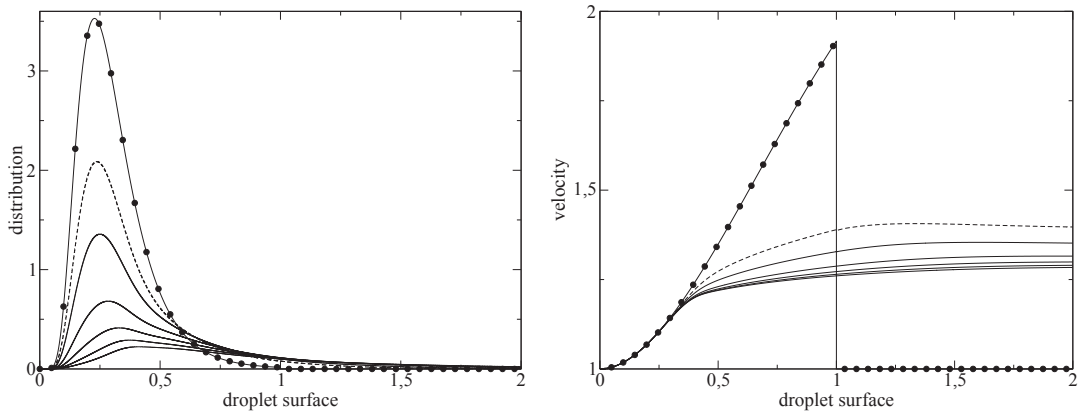


Figure 8: Size distribution (left) and velocity profile (right) for the pure coalescence test case with the lognormal initial distribution at $t$=0 (solid line with circles), at $t = 0.5$ (dashed line) and at $t$=1, 2, 3, 4, 5 (solid lines).

Computations are done with the OSM and the affine TSM models, with a constant and an affine reconstruction of the velocity inside the sections. For OSM with a constant reconstruction of the velocity, the coalescence source terms are computed thanks to the analytical formulae given in [25], whereas for the other methods, a 5 or 10 point Gauss-Legendre quadrature is used to compute the terms $Q^1_{ijk}$, $Q^{2*}_{ijk}$ and $Q^{3*}_{ijk}$. The sections are equidistributed for $S \in [0, S_{max}]$ with $S_{max} = 4$ and the last section is $[S_{max}, +\infty[$. This value of $S_{max}$ is large enough so that the mass of the last section will be small during all the computation (0.036% of the mass corresponds to droplets of surface bigger than $S_{max}$ at the end of the computation). The sections width can vary but the time step is constant equal to $10^{-2}$ s, for a time varying between 0 and 5. Indeed, the objective here is not to evaluate the well known ODE solver but to evaluate the model: the error induced by this choice is less than $3.10^{-6}$ for the reference solution on all the variables we will look at, as checked thanks to a computation with a ten times smaller time step. Moreover, the time step limitation (5.2) does not directly depend on the section width and we check during the computation that this limitation is always enforced for the chosen time step.

Since there is no analytical solution, the comparison will be done with a reference computation. This reference is given by a computation using OSM with a constant velocity reconstruction in the section. Moreover, the discretization involves 5121 sections for $S_{max} = 5$, i.e. with an 8 times smaller width of the sections than the most refined of

the other computations. The evolution of the size distribution as well as of the velocity profile is represented in Figure 8, using this solution.

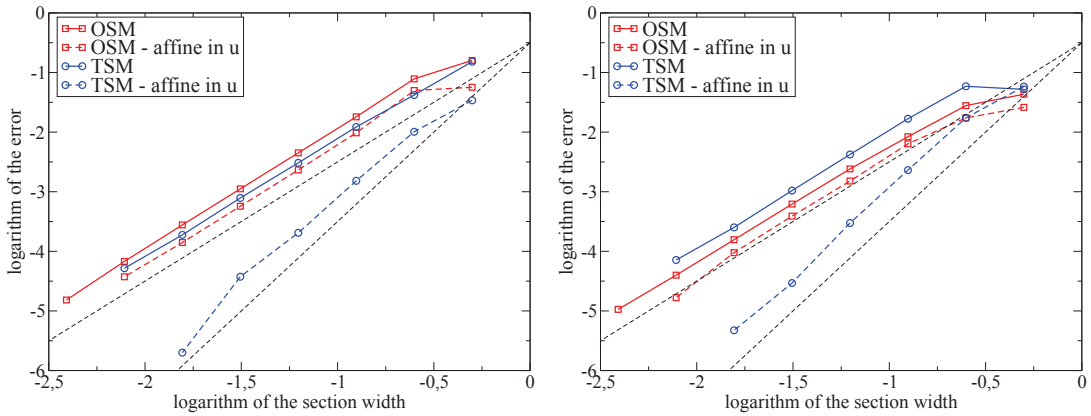


Figure 9: Coalescence test case with the lognormal initial distribution: $L_1$ norm of the error, depending on he section width, on the total number (left) and Sauter mean diameter (right) divided by their initial value. The straight lines of slope 2 and 3 are represented by black dashed lines.

The global mass and the momentum are conserved by construction of the scheme. To evaluate the accuracy of the different methods, we look first at the evolution of some other global variables: the total number density and the Sauter mean radius, defined by $\frac{\int_0^{+\infty} S^{3/2} f(S) \mathrm{d}S}{\int_0^{+\infty} S f(S) \mathrm{d}S}$. The $L_1$ norm of the error on these quantities (normalized by their initial value) as a function of the section width divided by $S_0$ is plotted in Figure 9. A 5 point Gauss-Legendre quadrature is used to compute the coalescence terms, here. But when using 10 point Gauss-Legendre quadratures, almost the same results are obtained. One can see that the accuracy of TSM with an affine velocity reconstruction in the section is much higher than for all the other methods, with a numerical order of accuracy almost equal to 3 and an accuracy better than the other methods with a two times smaller section width, for most of the discretizations. With this method, 17 sections are enough so that the error on the total number is less than 1%. One can also remark that the TSM method with a constant reconstruction of the velocity in the section is less accurate for the evaluation of the mean Sauter radius than OSM. This is due to the fact that, in a section (for an increasing velocity profile, like here), the velocity is underestimated for the largest droplets whereas it is overestimated for the smallest ones. If the coalescence is dominant with the biggest droplets, it means that the coalescence is underestimated for the largest droplets whereas it is overestimated for the smallest ones and this effect is reinforced by the affine representation of the distribution in the section.

We also look at the repartition of mass and momentum in the section by evaluating the $L_1$ norm of the errors on the number, mass and momentum:

$$\frac{1}{N_t}\sum_{n=1}^{N_t}\sum_{k=1}^{N}|n_k^n-\hat{n}_k^n| \qquad \frac{1}{N_t}\sum_{n=1}^{N_t}\sum_{k=1}^{N}|m_k^n-\hat{m}_k^n| \qquad \frac{1}{N_t}\sum_{n=1}^{N_t}\sum_{k=1}^{N}|m_k^n u_k^n-\hat{m}_k^n \hat{u}_k^n|$$

32

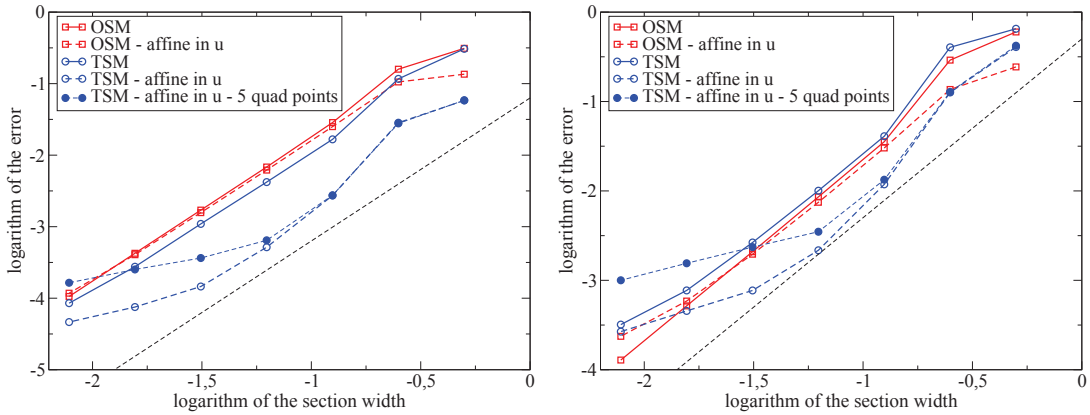


Figure 10: Coalescence test case with the lognormal initial distribution: $L_1$ norm of the error, depending on the section width, on the mass (left) and on the momentum (right). The straight line of slope two is represented in black dashed line.

where $\bar{n}_k^n$, $\bar{m}_k^n$, $\bar{m}_k^n \bar{u}_k^n$ are the number, mass and momentum given by the reference solution and corresponding to section $k$ of the computation. Here, the results are shown for computations using a 10 point Gauss-Legendre quadrature for the coalescence terms, except for TSM with the affine velocity reconstruction were both kinds of quadratures are used to see their effects. One still observe the better accuracy of TSM with the affine velocity reconstruction compared to the other methods. A saturation of the error is observed: it is due to the use of the quadrature for the computation of the coalescence source terms. This saturation occurs at a level that depends indeed on the number of quadrature points: the error on the computation of the coalescence source terms becomes then significant compared to the error due to the size discretization.

Finally, the results of the exponential TSM are not presented here, but it was tested with the adapted quadrature [9] using two or three nodes. This quadrature points needs to be computed for each reconstruction and for each domain $\mathcal{D}_{ijk}$. Analytical formula can be used with only two nodes but the error of this approximation becomes significant as soon as more than 30 sections are used. Then, for similar accuracy, the cost of this model is three times till twenty times larger than the affine TSM using 5 quadrature nodes.

## 6 Validation on an academic nozzle configuration featuring size-velocity coupling

The models and the corresponding schemes have been evaluated separately for each of the evaporation, drag and coalescence processes. Let us then compare them in a configuration coupling all these phenomena. In non-uniform flows the evolution of velocities depends on sizes through the drag process while the evolution of sizes depends on the size-conditioned velocity differences through evaporation and coalescence. A decelerat-

ing nozzle is considered as a baseline non-uniform flow since it exhibits the above coupling. By assessing how efficiently this case is rendered with the various strategies, we prove the ability of our moment method to tackle the difficulties that occur in industrial cases such as Diesel sprays [21] and particle phases in solid rocket motors [9].

## 6.1 Description of the configuration

Let us consider the decelerating nozzle test case with an unsteady injection of droplets defined in [25]. The OSM and affine TSM methods are compared on this test case where evaporation and coalescence significantly occur. Only essential characteristics of the configuration are given here, in a dimensionless way[‡]. A spray, transported by an incompressible gas flow, is injected in a 2D axi-symmetrical diverging conical nozzle. The streamlines of the gas as well as the trajectories of the droplets are assumed to be straight lines, so that only the dependance in the axial coordinate $z$ has to be considered. Moreover the effect of the droplets on the gaseous phase is not taken into account (see [25] for a discussion of the validity of the assumptions). Then, the gaseous velocity is characterized by its axial component $u_z(z) = \left(\frac{z_0}{z}\right)^2$, where $z_0 = 3.1$ is the coordinate of the nozzle inlet. The droplets slow down because of the deceleration of the gas flow, at a rate depending on their size and inertia, inducing velocity differences and therefore coalescence.

The NDF of the spray at the inlet is given by:

$$f(t,z_0,S,u) = f_0(S)\,[1+0.9\sin(2\pi t)]\,\delta(u-u_z(z_0)).$$

The injected droplet distribution $f_0$ was constant as a function of radius on the interval $R \in [1/2,1]$ and zero elsewhere in [25]. But in this case, the accuracy is limited by the singularity of the distribution. To avoid that, a quite similar but regular distribution is used: the beta PDF defined in section 3.1.5. The Knudsen number is $\mathrm{Kn} = 0.0471$, the evaporation rate is $\mathcal{K} = 0.283$ and the Stokes number is characterized by $\mathcal{A} = \frac{\mathrm{St}(S)}{S} = 0.357$.

The spatial domain is $[z_0,2z_0]$ so that only a few droplets go out of this domain, most of them being completely evaporated before they could go through the domain. The computations are done for a time corresponding to 9 periods of the injected mass oscillations, since after 8 periods, the solution becomes periodic in the whole domain.

## 6.2 Numerical strategy and results

Concerning the numerical strategy used for the computations with OSM or TSM, a Strang splitting is used between the transport in the physical space and the transport in the phase space (source terms of evaporation, drag and coalescence). All numerical schemes

[‡]Compared to the case described in [25], dimensionless variables are defined thanks to the use of typical values for the time ($T \equiv 0.01611$s, the period of the oscillations at the injection), for the droplet surface ($S_0 = 4\pi R_0^2$ with $R_0 = 30\mu$m), for the velocity ($u_z(z_0) = 4\mathrm{ms}^{-1}$, the velocity at the nozzle inlet) and for the droplet number density ($n_0 = 2.9\ 10^{10}\mathrm{m}^{-3}$). The Knudsen number is then defined by $\mathrm{Kn} = 1/(T u_z(z_0) S_0 n_0)$.

have to preserve the non-negativity of the mass densities of the sections and also the realizability conditions for TSM. For the transport in the physical space, a second order kinetic scheme is used, based on the one given in [4] but specifically adapted to the nozzle configuration. This scheme is described in Appendix C. Let us highlight in the particular case of the model considering an affine reconstruction of the velocity in the section, that the velocity is assumed to be constant in the sections for this transport operator, since it is not the aim of this paper to develop a transport scheme for this model in the nozzle configuration. Moreover, a scheme adapted to this model can be found in [38] for more classical configurations, with cartesian meshes. For the transport in phase space, a splitting is done between drag/evaporation and coalescence. The scheme for evaporation and drag is given in section 4.2.1 and the scheme for coalescence is given in section 5.

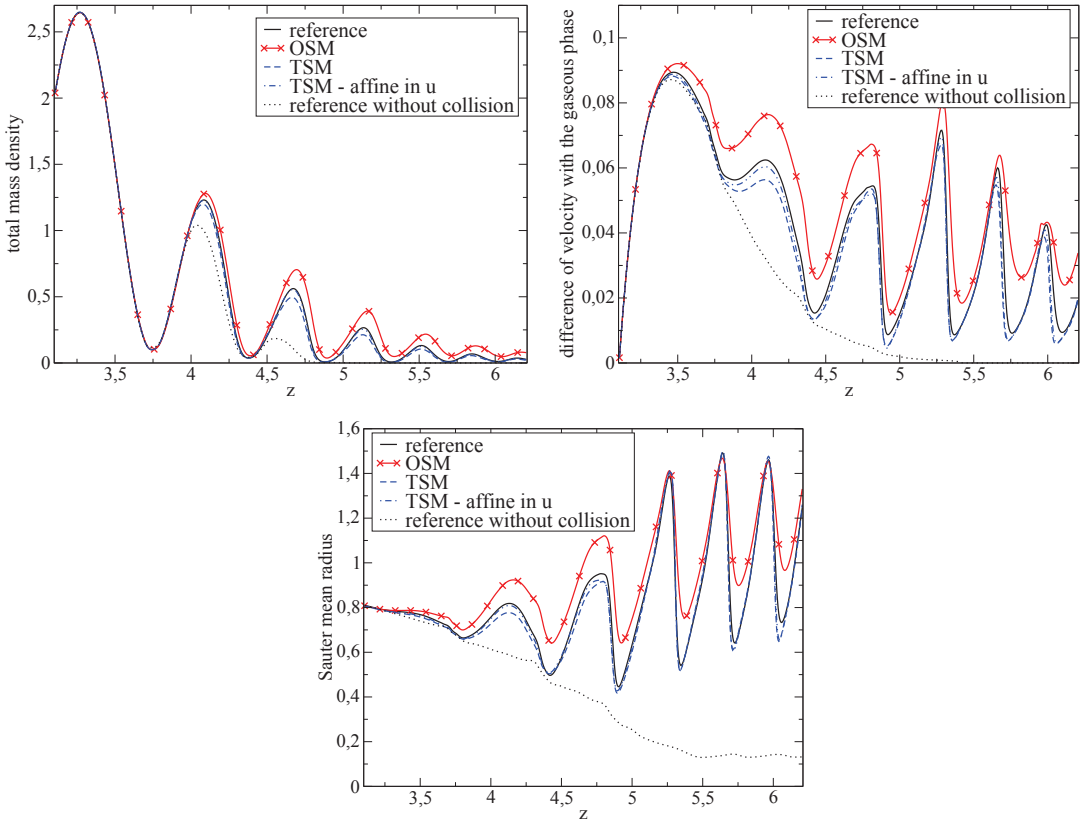


Figure 11: Results for the nozzle test case with OSM and affine TSM with a constant or an affine reconstruction of the velocity in the section: total mass density (top left), mean velocity minus gas velocity (top right), Sauter mean radius (bottom).

A 600-point uniform discretization of the spatial domain is used. The splitting time step is equal to 0.0025 in such a way that the convective CFL is about 0.48. This choice leads to small errors due to the time and space discretizations compared to the error

due to the size discretization. A reference solution is obtained by using OSM with 1024 sections equidistributed in surface between 0 and $S_{max} = 7.111$, plus the last section. The choice of $S_{max}$ allows to obtain a completely negligible mass in the last section, this section being badly represented by OSM. For the other computations, sections with a constant width $\Delta S = 0.25$ are considered in $[0, S_{max}]$, plus a last section $[S_{max}, +\infty[$, with a maximal value of the surface then depending on the number $N$ of sections: $S_{max} = (N-1)\Delta S$. Considering OSM, a total of 20 sections are used, whereas only 12 sections are used for TSM, with a constant or an affine reconstruction of the velocity. Indeed, adding more sections only leads to a slight accuracy improvement for this method, which is able to describe correctly the last section. The profiles at $t = 8.44$ (in the ninth period) of the total mass density, the mass averaged velocity and the Sauter mean radius are plotted in Figure 11. One can see the accuracy of TSM compared to OSM even with a smaller number of sections. Moreover, with the affine reconstruction of the velocity in the section, TSM leads to even better results, very close to the reference solution.

# 7 Conclusion

In this paper, we have provided a very robust affine closure for the Two Size Moment method for polydisperse spray simulations, which allows to reduce the overall cost and increase accuracy and stability compared to previous approaches. In the pursuance of high order coupled methods, the velocity reconstruction has also been improved. The new method allows an easy computation of the source terms. Moreover, robust and accurate schemes were developed for simplified source terms, ensuring the realizability of the moments and easily extendable to more complex physical models, thanks to the flexibility of the present strategy. The verification of the method has been done on various cases, with evaporation, drag and coalescence, and especially on an unsteady 2D case. The high order of the reconstruction and of the schemes have then been shown in the asymptotics of a large number of sections. Also the accuracy of the method was exhibited when a reduced number of sections is used. So the description of the spray, of its size polydispersity, of its size-conditioned velocities, and of their evolution through drag, evaporation, coalescence *etc.*, can be suitably achieved with a Two Size Moment method based on the present affine reconstruction with a low number of sections (below 10). It is important for industrial applications such as spray combustion, spray in solid rocket motors and many other industrial needs, since the numerical cost is a crucial issue. In our point of view, the present strategy is a good trade-off between complexity/accuracy and flexibility/cost without renouncing to robustness, which is a key feature of numerical simulation. In addition, this method is a good candidate for being coupled to the Anisotropic Gaussian velocity closure introduced to treat particle trajectory crossings [37]. This combination is expected to describe both the size polydispersion and also the velocity dispersion induced by some droplet trajectory crossing especially occurring in turbulent flows [12, 13].

36

# A Affine reconstruction in volume variable

When considering the volume variables, mass and number densities in the section are then integer moments of the NDF: $n_k = \int_{V_{k-1}}^{V_k} n^V(V)\mathrm{d}V$ and $m_k = \int_{V_{k-1}}^{V_k} V n^V(V)\mathrm{d}V$. The same kind of reconstruction as in section 3.1.2 can then be considered:

$$f_a^v(V) = \begin{cases} 0 & \text{si } V_{k-1} \leq V \leq V_a^{(k)} \\ \alpha_k + (\beta_k - \alpha_k)\frac{V - V_a^{(k)}}{V_b^{(k)} - V_a^{(k)}} & \text{si } V_a^{(k)} \leq V \leq V_b^{(k)} \\ 0 & \text{si } V_b^{(k)} \leq V \leq V_k \end{cases} \tag{A.1}$$

with the same three cases as for the affine in $S$ reconstruction, meaning that $f_a^v$ is continuous inside the section. One can then easily prove the following proposition:

**Proposition A.1** (Affine reconstruction from integer moments)**.** Let $n_k > 0$ and $m_k \in ]V_{k-1}n_k, V_k n_k[$, for some $k \in \{1,2,\ldots,N\}$. Then, their exists on $]V_{k-1}, V_k[$ a unique non-negative continuous function $f_a^v$ given by (3.4) and such that

$$\int_{V_{k-1}}^{V_k} f_a^v(V)\mathrm{d}V = n_k, \qquad \int_{V_{k-1}}^{V_k} V f_a^v(V)\mathrm{d}V = m_k. \tag{A.2}$$

Its parameters are given by:

- If $V_{k-1} < \dfrac{m_k}{n_k} < \dfrac{V_k + 2V_{k-1}}{3}$, then $V_a^{(k)} = V_{k-1}$, $\beta_k = 0$ and

$$V_b^{(k)} = 3\frac{m_k}{n_k} - 2V_{k-1}, \quad \alpha_k = \frac{2n_k^2}{3(m_k - V_{k-1}n_k)}. \tag{A.3}$$

- If $\dfrac{V_k + 2V_{k-1}}{3} \leq \dfrac{m_k}{n_k} \leq \dfrac{2V_k + V_{k-1}}{3}$, then $V_a^{(k)} = V_{k-1}$, $V_b^{(k)} = V_k$ and

$$\alpha_k = \frac{2}{(\Delta V_k)^2}[(2V_k + V_{k-1})n_k - 3m_k], \quad \beta_k = \frac{2}{(\Delta V_k)^2}[3m_k - (V_k + 2V_{k-1})n_k]. \tag{A.4}$$

- If $\dfrac{2V_k + V_{k-1}}{3} < \dfrac{m_k}{n_k} < V_k$, then $V_b^{(k)} = V_k$, $\alpha_k = 0$ and

$$V_a^{(k)} = 3\frac{m_k}{n_k} - 2V_k, \quad \beta_k = \frac{2n_k^2}{3(V_k n_k - m_k)}. \tag{A.5}$$

The same kind of analysis as in sections 3.1.3 and 3.1.4 could be done for this reconstruction. For example, one can show that, in case 2: $\|f - f_a^v\|_{L^\infty(V_{k-1},V_k)} \leq \dfrac{17}{12}\Delta V^2 \|f''\|_{L^\infty(0,1)}$.

But the evaporation with a constant rate $\mathcal{K} = \mathcal{K}_S$ generates NDFs $f^S$ that are non-necessarily zero at $S=0$, since the solution is shift of the initial NDF. Let us then consider such kind of function (in fact, the gamma and regular functions defined in section 3.1.5) and let us do its piecewise affine reconstruction $f_a^v$ from its moments. The corresponding function $f^S(S) = \frac{3}{2}\sqrt{S} f_a^v\left(S^{3/2}\right)$ is plotted in Figure 12 for 4 or 16 sections. When the initial distribution if zero at $S=0$, as the gamma one, the reconstruction is good. But when it is not the case, the accuracy is affected, especially close to zero and the evaporation fluxes will not be accurately evaluated. This shows that this kind of reconstruction is not adapted to an accurate resolution of the evaporation.

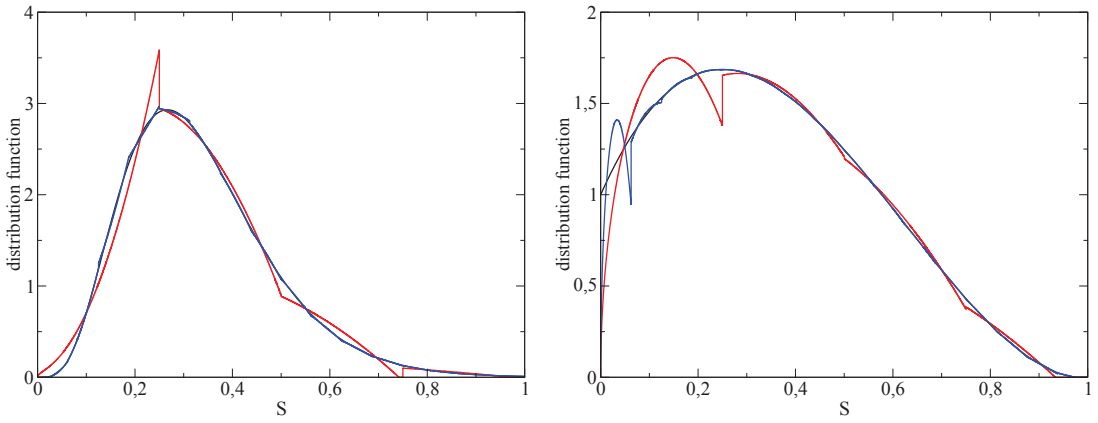


Figure 12: Distributions as a function of $S$ corresponding to a linear reconstruction in $V$ with 4 (red curve) and 16 (blue curve) sections of the gamma function (left) and of the regular one (right).

# B Backward Euler scheme for evaporation and realizability

Let us evidence the realizability problems with the use of an explicit Euler scheme directly on the purely evaporating system (4.1,4.2):

$$n_k^{n+1} = n_k^n + \Delta t\left[\mathcal{K}\kappa_{k+1}(t,S_k) - \mathcal{K}\kappa_k(t,S_{k-1})\right],$$
$$m_k^{n+1} = m_k^n + \Delta t\left[\mathcal{K}S_k^{3/2}\kappa_{k+1}(t,S_k) - \mathcal{K}S_{k-1}^{3/2}\kappa_k(t,S_{k-1}) - \frac{3}{2}\int_{S_{k-1}}^{S_k} S^{1/2}\mathcal{K}\kappa_k(t,S)\mathrm{d}S\right].$$

then, the new moment vector $(n_k^{n+1}, m_k^{n+1})$ satisfies the realizability condition (2.6) if and only if

$$\mathcal{K}\Delta t\frac{3}{2}\int_{S_{k-1}}^{S_k} S^{1/2}\left[\kappa_k(S) - \kappa_{k+1}(S_k)\right]\mathrm{d}S \leq \int_{S_{k-1}}^{S_k}\left[S^{3/2} - S_{k-1}^{3/2}\right]\kappa_k(S)\mathrm{d}S$$
$$\mathcal{K}\Delta t\frac{3}{2}\int_{S_{k-1}}^{S_k} S^{1/2}\left[\kappa_k(S_{k-1}) - \kappa_k(S)\right]\mathrm{d}S \leq \int_{S_{k-1}}^{S_k}\left[S_k^{3/2} - S^{3/2}\right]\kappa_k(S)\mathrm{d}S$$

Let us consider, for example $\kappa_{k+1}(S_k)=0$, the first constraint is written

$$\mathcal{K}\Delta t \leq \frac{2\int_{S_{k-1}}^{S_k}\left[S^{3/2}-S_{k-1}^{3/2}\right]\kappa_k(S)\mathrm{d}S}{3\int_{S_{k-1}}^{S_k}S^{1/2}\kappa_k(S)\mathrm{d}S}$$

and, if $m_k^n/n_k^n$ tends to zero (which corresponds to case 1 of the reconstruction, where $S_b^{(k)}$ tends to $S_{k-1}$), then the right-hand side term is equivalent to $\frac{2(S_b^{(k)^{3/2}})-S_{k-1}^{3/2}}{3\sqrt{S_b^{(k)}}}$, which tends to zero. So, in this case of an emptying section, the time step has eventually to become very small to ensure the realizability condition (2.6). This shows that this ODE solver, as well as any explicit SSP Runge-Kutta method, may introduce some realizability failures and will then not be robust.

# C Transport scheme for the nozzle test case

In order to discretize the transport part of the multi-fluid system (2.8-2.10), that is, the left-hand side of the system of conservation equations for unsteady configurations, we consider a second-order finite volume kinetic scheme similar to the one introduced by Bouchut et al. for pressureless gas dynamics equations [4] and already adapted for OSM in the nozzle configuration in [25]. For the sake of simplicity, the variables of each section $k$ are denoted $\rho$ for the mass density $m_k$, $n$ for the number density $n_k$ and $u$ for the axial velocity $u_k$. Moreover, the momentum is denoted $q=\rho u$. In the axisymetrical configuration, there are no azimuthal velocity and thanks to the similarity assumption the axial velocity only depends on the axial coordinates $z$ and the reduced radial velocity $u_r/r$ is $u/z$. The equations then reduce to the following 1D unsteady system:

$$\partial_t\begin{pmatrix} n \\ \rho \\ q \end{pmatrix}+2\frac{u}{z}\begin{pmatrix} n \\ \rho \\ q \end{pmatrix}+\partial_z\left(u\begin{pmatrix} n \\ \rho \\ q \end{pmatrix}\right)=0.$$

As in [4,25], a correspondance is done with a kinetic equation, adapted here to our configuration. Indeed, starting at time $t^n$ with the functions $\rho^n(z)$, $n^n(z)=\rho^n(z)\mu^n(z)$ and $u^n(z)$, the functions at time $t^{n+1}$ can be obtained by solving the transport equation derived from the similarity assumption:

$$\begin{aligned} &\partial_t f+2\frac{\xi}{z}f+\xi\partial_z f=0, \\ &f(z,\xi,\zeta;t^n)=f^n(z,\xi,\zeta)=M(\rho^n(z),\mu^n(z),u^n(z),\xi,\zeta), \end{aligned} \tag{C.1}$$

where the Maxwellian $M$ is defined for any $\rho>0$, $(\mu,u,\xi,\zeta)\in\mathbb{R}^4$ by $M(\rho,\mu,u,\xi,\zeta)=\rho\delta((\xi,\zeta)-(u,\mu))$ and by projecting the obtained distributions in order to get their new

moments. The analytical solution of the problem at the kinetic level is:

$$f(z,\xi,\zeta;t)=\left(\frac{z-\xi(t-t^n)}{z}\right)^2 f^n(z-\xi(t-t^n),\xi,\zeta) \tag{C.2}$$

The new moments are then obtained by projecting the exact solution:

$$\begin{pmatrix}\rho^{n+1}(z)\\ n^{n+1}(z)\\ q^{n+1}(z)\end{pmatrix}=\rho^{n+1}(z)\begin{pmatrix}1\\ \mu^{n+1}(z)\\ u^{n+1}(z)\end{pmatrix}=\int_{\mathbb{R}^2}\begin{pmatrix}1\\ \zeta\\ \xi\end{pmatrix}f(z,\xi,\zeta;t^{n+1})\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\zeta$$

Let us notice here that the variable $\zeta$ is just added here to be able to write the equation on the number $n$. It represents the ratio $n/\rho$, ie $n_k/m_k$ and it then belongs to the interval $\left]\frac{1}{S_k^{3/2}},\frac{1}{S_{k-1}^{3/2}}\right[$.

Here, a finite volume is used with a uniform spatial discretization, the size of the cells being denoted $\Delta z$ and the averaged values of $\rho^n(z)$, $n^n(z)$ and $q^n(z)$ on the cell $j$ defined by $[z_{j-\frac{1}{2}},z_{j+\frac{1}{2}}]$ and denoted $\rho_j^n$, $n_j^n=\rho_j^n\mu_j^n$ and $q_j^n=\rho_j^n u_j^n$. The scheme is then:

$$\begin{pmatrix}\rho_j^{n+1}\\ n_j^{n+1}\\ q_j^{n+1}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\rho_j^n\\ n_j^n\\ q_j^n\end{pmatrix}-2\frac{\Delta t}{\Delta z}G_j^n-\frac{\Delta t}{\Delta z}\left[F_{j+\frac{1}{2}}^n-F_{j-\frac{1}{2}}^n\right],$$

where the fluxes are given by

$$F_{j+\frac{1}{2}}^n=\frac{1}{\Delta t}\int_{t^n}^{t^{n+1}}\int_{\mathbb{R}^2}\xi\begin{pmatrix}1\\ \zeta\\ \xi\end{pmatrix}f(z,\xi,\zeta;t)\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\zeta\mathrm{d}t$$

$$G_j^n=\frac{1}{\Delta t\Delta x}\int_{t^n}^{t^{n+1}}\int_{z_{j-\frac{1}{2}}}^{z_{j+\frac{1}{2}}}\int_{\mathbb{R}^2}\frac{\xi}{z}\begin{pmatrix}1\\ \zeta\\ \xi\end{pmatrix}f(z,\xi,\zeta;t)\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\zeta\mathrm{d}t\mathrm{d}z$$

The obtained fluxes rely, through (C.2), on the knowledge of functions $\rho^n(z)$, $\mu^n(z)$ and $u^n(z)$, which have to be determined from the discrete values $\rho_j^n$, $n_j^n$ and $q_j^n$. We use piecewise constant over half-cells, as for the simplified second-order kinetic scheme defined in [4]. If we do not write, on purpose for the sake of legibility, the $n$ exponent, the moments take the form

$$\begin{aligned}&\rho(z)=\rho_{j-\frac{1}{2}}^R \qquad \mu(z)=\mu_{j-\frac{1}{2}}^R \qquad u(z)=u_{j-\frac{1}{2}}^R \qquad z_{j-\frac{1}{2}}<z<z_j,\\ &\rho(z)=\rho_{j+\frac{1}{2}}^L \qquad \mu(z)=\mu_{j+\frac{1}{2}}^L \qquad u(z)=u_{j+\frac{1}{2}}^L \qquad z_j<z<z_{j+\frac{1}{2}},\end{aligned}$$

the values in each half cells being computed in the same way as in [4,25]. Let us denote

$$\alpha_{j-\frac{1}{2}}^R=\frac{u_{j-\frac{1}{2}}^R\Delta t}{z_{j-\frac{1}{2}}},\qquad \alpha_{j+\frac{1}{2}}^L=\frac{u_{j+\frac{1}{2}}^L\Delta t}{z_{j+\frac{1}{2}}},\qquad \beta_{j-\frac{1}{2}}^R=\frac{u_{j-\frac{1}{2}}^R\Delta t}{z_j},\qquad \beta_{j+\frac{1}{2}}^L=\frac{u_{j+\frac{1}{2}}^L\Delta t}{z_j}.$$

Under the CFL-like condition $\frac{\Delta t}{\Delta z}\sup_z|u^n(z)|\leq\frac{1}{2}$, and assuming that all velocities are positive, the fluxes can be written:

$$F^n_{j+\frac{1}{2}}=\rho^L_{j+\frac{1}{2}}u^L_{j+\frac{1}{2}}\begin{pmatrix}1\\ \mu^L_{j+\frac{1}{2}}\\ u^L_{j+\frac{1}{2}}\end{pmatrix}\left[1-\alpha^L_{j+\frac{1}{2}}+\frac{1}{3}(\alpha^L_{j+\frac{1}{2}})^2\right]$$

$$\begin{aligned}G^n_j=&\rho^L_{j-\frac{1}{2}}u^L_{j-\frac{1}{2}}\begin{pmatrix}1\\ \mu^L_{j-\frac{1}{2}}\\ u^L_{j-\frac{1}{2}}\end{pmatrix}\left[\log(1+\alpha^L_{j-\frac{1}{2}})-\alpha^L_{j-\frac{1}{2}}\left(1-\frac{\alpha^L_{j-\frac{1}{2}}}{6}\right)+\frac{\alpha^L_{j-\frac{1}{2}}}{2(1+\alpha^L_{j-\frac{1}{2}})}\right]\\ &+\rho^R_{j-\frac{1}{2}}u^R_{j-\frac{1}{2}}\begin{pmatrix}1\\ \mu^R_{j-\frac{1}{2}}\\ u^R_{j-\frac{1}{2}}\end{pmatrix}\left[\log\left(\frac{z_j}{z_{j-\frac{1}{2}}}\right)+\log\left(\frac{1+\beta^R_{j-\frac{1}{2}}}{1+\alpha^R_{j-\frac{1}{2}}}\right)-\frac{\alpha^R_{j-\frac{1}{2}}}{2(1+\alpha^R_{j-\frac{1}{2}})}+\frac{\beta^R_{j-\frac{1}{2}}}{2(1+\beta^R_{j-\frac{1}{2}})}\right]\\ &+\rho^L_{j+\frac{1}{2}}u^L_{j+\frac{1}{2}}\begin{pmatrix}1\\ \mu^L_{j+\frac{1}{2}}\\ u^L_{j+\frac{1}{2}}\end{pmatrix}\left[\log\left(\frac{z_{j+\frac{1}{2}}}{z_j}\right)-\log\left(1+\beta^L_{j+\frac{1}{2}}\right)+\alpha^L_{j+\frac{1}{2}}\left(1-\frac{\alpha^L_{j+\frac{1}{2}}}{6}\right)-\frac{\beta^L_{j+\frac{1}{2}}}{2(1+\beta^L_{j+\frac{1}{2}})}\right],\end{aligned}$$

## Acknowledgements

The present research was done thanks to a Ph.D. Grant from DGA, Ministry of Defense (M.S. Amiet, Technical Monitor) and a Ph. D. Grant from ONERA. The authors would also like to thank Prof. Marc Massot for several helpful discussions and for the precious feedback he provided about this manuscript.

### References

[1] P. Achim. *Simulation de collisions, coalescence et rupture de gouttes par une approche lagrangienne: application aux moteurs à propergol solide*. PhD thesis, Faculté des Sciences de l'Université de Rouen, 1999.

[2] A.A. Amsden, P. J. O'Rourke, and T. D. Butler. Kiva II, a computer program for chemically reactive flows with sprays. Technical Report LA-11560-MS, Report Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, New Mexico, 1989.

[3] G. A. Bird. Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows. *Oxford Science Publications*, 42, 1994.

[4] F. Bouchut, S. Jin, and X. Li. Numerical approximations of pressureless and isothermal gas dynamics. *SIAM J. Numer. Anal.*, 41(1):135–158, 2003.

[5] F. Costabile, M.I. Gualtieri, and R. Luceri. A modification of Muller's method. *CALCOLO*, 43(1):39–50, 2006.

[6] S. de Chaisemartin. *Eulerian models and numerical simulation of turbulent dispersion for polydisperse evaporating sprays*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, France, 2009. Available online at http://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00443982/en/.

[7] O. Desjardins, R.O. Fox, and P. Villedieu. A quadrature-based moment method for dilute fluid-particle flows. *Journal of Computational Physics*, 227(4):2514 – 2539, 2008.

[8] F. Doisneau. *Eulerian modeling and simulation of polydisperse moderately dense coalescing spray flows with nanometric-to-inertial droplets : application to Solid Rocket Motors*. Phd thesis, Ecole Centrale Paris, April 2013.

[9] F. Doisneau, F. Laurent, A. Murrone, J. Dupays, and M. Massot. Eulerian multi-fluid models for the simulation of dynamics and coalescence of particles in solid propellant combustion. *Journal of Computational Physics*, 234(0):230 – 262, 2013.

[10] G. Dufour. *Modélisation multi-fluide eulérienne pour les écoulements diphasiques à inclusions dispersées*. PhD thesis, Université Paul Sabatier Toulouse III, 2005.

[11] J. K. Dukowicz. A particle-fluid numerical model for liquid sprays. *J. Comput. Phys.*, 35(2):229–253, 1980.

[12] V. Dupif. *Modélisation et simulation de l'écoulement diphasique dans les moteurs à propergol solide par une approche eulérienne polydispersée en taille et en vitesse*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, France, 2017.

[13] V. Dupif, J. Lagarde, M. Boileau, F. Laurent, and M. Massot. Two-size moment eulerian multi-fluid method describing the statistical trajectory crossing: modeling and numerical scheme. in preparation, 2015.

[14] O. Emre, R. O. Fox, M. Massot, S. De Chaisemartin, S. Jay, and F. Laurent. Eulerian modeling of a polydisperse evaporating spray under realistic internal-combustion-engine conditions. *Flow, Turbulence and Combustion*, 93(4):689–722, December 2014.

[15] F. Gelbard, Y. Tambour, and J. H. Seinfeld. Sectional representations for simulating aerosol dynamics. *Journal of Colloid and Interface Science*, 76(2):541 – 556, 1980.

[16] S. Gottlieb, C.-W. Shu, and E. Tadmor. Strong stability-preserving high-order time discretization methods. *SIAM review*, 43(1):89–112, 2001.

[17] J. Hylkema. *Modélisation cinétique et simulation numérique d'un brouillard dense de gouttelettes. Application aux propulseurs à poudre*. PhD thesis, ENSAE, 1999.

[18] J. Hylkema and P. Villedieu. A random particle method to simulate coalescence phenomena in dense liquid sprays. In *Lecture Notes in Physics*, volume 515, pages 488–493, Arcachon, France, 1998. Proc. 16th Int. Conf. on Num. Meth. in Fluid Dyn.

[19] D. Kah, O. Emre, Q. H. Tran, S. De Chaisemartin, S. Jay, F. Laurent, and M. Massot. High order moment method for polydisperse evaporating sprays with mesh movement: application to internal combustion engines. *International Journal of Multiphase Flow*, 71:38–65, 2015.

[20] D. Kah, F. Laurent, L. Fréret, S. de Chaisemartin, R.O. Fox, J. Reveillon, and M. Massot. Eulerian quadrature-based moment models for polydisperse evaporating sprays. *Flow, Turbulence and Combustion*, 85(3-4):649–676, 2010. (Special Issue Dedicated to Stephen B. Pope).

[21] D. Kah, F. Laurent, M. Massot, and S. Jay. A high order moment method simulating evaporation and advection of a polydisperse liquid spray. *Journal of Computational Physics*, 231(2):394–422, January 2012.

[22] F. Laurent. Analyse numérique d'une méthode multi-fluide Eulérienne pour la description de sprays qui s'évaporent. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 334(5):417–422, 2002.

[23] F. Laurent. Numerical analysis of Eulerian multi-fluid models in the context of kinetic formulations for dilute evaporating sprays. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 40(3):431–468, 2006.

[24] F. Laurent and M. Massot. Multi-fluid modeling of laminar poly-dispersed spray flames: origin, assumptions and comparison of the sectional and sampling methods. *Combust. Theory and Modelling*, 5:537–572, 2001.

[25] F. Laurent, M. Massot, and P. Villedieu. Eulerian multi-fluid modeling for the numerical simulation of coalescence in polydisperse dense liquid sprays. *J. Comput. Phys.*, 194:505–543, 2004.
[26] D. L. Marchisio and R. O. Fox. Solution of population balance equations using the direct quadrature method of moments. *Journal of Aerosol Science*, 36:43–73, 2005.
[27] M. Massot, F. Laurent, D. Kah, and S. de Chaisemartin. A robust moment method for evaluation of the disappearance rate of evaporating sprays. *SIAM J. Appl. Math.*, 70(8):3203–3234, 2010.
[28] R. McGraw. Description of aerosol dynamics by the quadrature method of moments. *Aerosol Science and Technology*, 27:255–265, 1997.
[29] L. R. Mead and N. Papanicolaou. Maximum entropy in the problem of moments. *J. Math. Phys.*, 25(8):2404–2417, 1984.
[30] C. Ridders. A new algorithm for computing a single root of a real continuous function. *Circuits and Systems, IEEE Transactions on*, 26(11):979–980, Nov 1979.
[31] M. Sabat. *Modèles Eulériens et méthodes numériques pour la description des sprays polydispersés turbulents*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, France, 2016.
[32] M. Sabat, A. Larat, A. Vié, and M. Massot. On the development of high order realizable schemes for the Eulerian simulation of disperse phase flows: a convex-state preserving Discontinuous Galerkin method. *Journal of Computational Multiphase Flows*, 6(3):247–270, 2014.
[33] A. Sibra. *Modélisation et étude de l'évaporation et de la combustion de gouttes dans les moteurs à propergol solide par une approche eulérienne Multi-Fluide*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, France, 2015.
[34] A. Sibra, J. Dupays, A. Murrone, F. Laurent, and M. Massot. Simulation of reactive polydisperse sprays strongly coupled to unsteady flows in solid rocket motors: Efficient strategy using eulerian multi-fluid methods. submitted, available online at https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01063816, 2014.
[35] Y. Tambour. A Lagrangian sectionnal approach for simulating droplet size distribution of vaporizing fuel in a turbulent jet. *Combustion and Flame*, 15:1907–1925, 1985.
[36] C. Le Touze, A. Murrone, and H. Guillard. Multislope {MUSCL} method for general unstructured meshes. *Journal of Computational Physics*, 284(0):389 – 418, 2015.
[37] A. Vié, F. Doisneau, and M. Massot. On the Anisotropic Gaussian closure for the prediction of inertial-particle laden flows. *CiCP*, 17(1):1–46, 2015.
[38] A. Vié, F. Laurent, and 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(0):177 – 210, 2013.
[39] F. A. Williams. Spray combustion and atomization. *Phys. Fluids*, 1:541–545, 1958.
[40] C Yuan and R. O. Fox. Conditional quadrature method of moments for kinetic equations. *Journal of Computational Physics*, 230(22):8216 – 8246, 2011.
[41] C. Yuan, F. Laurent, and R.O. Fox. An extended quadrature method of moments for population balance equations. *Journal of Aerosol Science*, 51(0):1 – 23, 2012.

# Références


Abgrall, R. (1994). On essentially non-oscillatory schemes on unstructured meshes: analysis and implementation. *Journal of Computational Physics*, 114 :45–54. *(p. 151)*

Abramzon, B. and Sirignano, W. A. (1989). Droplet vaporization model for spray combustion calculations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 32(9) :1605–1618. *(p. 83)*

Ait Atmane, Y. (2012). *Synthèse de nanoparticules d'aluminium et enrobage par des polymères pour des applications énergétiques*. Thèse de l'Université Paris Diderot - Paris 7. *(p. 32)*

Amsden, A. A., O'Rourke, P. J., and Butler, T. D. (1989). KIVA II a computer program for chemically reactive flows with sprays. Technical Report LA-11560-MS, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, New Mexico. *(p. 90)*

Anthoine, J. (2000). *Experimental and numerical study of aeroacoustic phenomena in large solid propellant boosters, with application to the Ariane 5 solid rocket motor*. Thèse de l'Université libre de Bruxelles. *(p. 27, 28)*

Apte, S. V., Martin, M., and Patankar, N. A. (2009). A numerical method for fully resolved simulation (FRS) of rigid particle-flow interactions in complex flows. *Journal of Computational Physics*, 228(8) :2712–2738. *(p. 73)*

Apte, S. V. and Yang, V. (2003). A large-eddy simulation of transition and flow instability in a porous-walled chamber with mass injection. *Journal of Fluid Mechanics*, 477 :215–225. *(p. 29)*

Attili, A., Favini, B., Di Giacinto, M., and Serraglia, F. (2009). Numerical simulation of multiphase flows in solid rocket motors. AIAA paper 2009-5507*, 45th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*. 2-5 August 2009, Denver, CO. *(p. 3, 45, 227)*

Avalon, G., Ugurtas, B., Grisch, F., and Bresson, A. (2000). Numerical computations and visualization tests of the flow inside a cold gas simulation with characterization of a parietal vortex-shedding. AIAA paper 2000-3387*, 36th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*. 16-19 July 2000, Huntsville, AL. *(p. 27)*

Balachandar, S. and Eaton, J. K. (2010). Turbulent dispersed multiphase flow. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 42 :111–133. *(p. 3, 68)*

Balescu, R. (1997). *Statistical dynamics - Matter out of Equilibrium*. Imperial College Press. *(p. 75)*

Ballereau, S., Godfroy, F., Gallier, S., Orlandi, O., Thepenier, J., Robert, E., and Cesco, N. (2011). Evaluation method of thrust oscillations in large SRM-application to segmented SRM's. AIAA paper 2011-6054*, 47th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*. 31 July - 3 August 2011, San Diego, CA. *(p. 29)*

Ballereau, S., Godfroy, F., Guery, J. F., and Ribereau, D. (2003). Assessment on analysis and prediction method applied on thrust oscillations of Ariane 5 solid rocket boosters. AIAA paper 2003-4675*, 39th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*. 20-23 July 2003, Huntsville, AL. *(p. 22, 26, 40)*

Barrere, M., Jaumotte, A., Fraeijs de Veubeke, B., and Vandenkerckhove, J. (1960). *Rocket Propulsion*. Elsevier Publishing Company. *(p. 24)*

Barron, J. T. (1991). An experimental study on the effects of dispersed particles on acoustic growth rates in a modified rijke burner. Master's thesis, Brigham Young University. *(p. 44)*

Basset, T. (1997). *Contribution à la modélisation des écoulements diphasiques et réactifs internes : application aux propulseurs à propergol solide*. Thèse de l'Université de Provence, Aix-Marseille I. *(p. 51, 53)*

Batchelor, G. K. (1972). Sedimentation in a dilute dispersion of spheres. *Journal of Fluid Mechanics*, 52 :245–268. *(p. 75)*

Beckstead, M. W. (1987). Evidences for Distributed Combustion. *Proceedings of the 24th JANNAF Combustion Meeting*, pages 1–12. CPIA Pub, Vol. I. *(p. 39, 44)*

Beckstead, M. W. (2002). Modeling aluminum combustion. RTO AVT/VKI Special Course on Internal Aerodynamics in Solid Rocket Propulsion. *(p. xv, 18, 53, 56)*

Beckstead, M. W. (2005). Correlating aluminum burning times. *Combustion, Explosions, and Shock Waves*, 41(5) :533–546. *(p. 52)*

Beckstead, M. W. and Brooks, K. P. (1993). Distributed combustion in solid propellants. AFORSR-91-0152. *(p. 39)*

Beckstead, M. W. and Culick, F. E. C. (1971). A comparison of analysis and experiment for solid propellant combustion instability. *AIAA Journal*, 9(1) :147–154. *(p. 44)*

Bellec, R., Duterque, J., and Lengellé, G. (1997). Modélisation de la combustion des propergols solides aluminisés. Rapport technique ONERA RT 37/7128 EN. *(p. 32)*

Belyaev, A. F., Frolov, Y. V., and Korotov, A. I. (1968). Combustion and ignition of particles of finely dispersed aluminum. *Fizika Goreniya i Vzryva*, 4(3) :323–329. *(p. 33, 51)*

Berthon, C. (2006). Numerical approximations of the 10-moment Gaussian closure. *Mathematics of Computation*, 75(256) :1809–1831. *(p. 97)*

Biagi, M., Mauries, A., Perugini, P., and Pin, B. (2011). Structural qualification of P80 solid rocket motor composite case. AIAA PAPER 2011-5958*, 47th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit.* 31 July - 3 August 2011, San Diego, CA. *(p. 21)*

Billet, G., Giovangigli, V., and de Gassowski, G. (2008). Impact of volume viscosity on a shock/-hydrogen bubble interaction. *Combustion Theory and Modelling*, 12(2) :221–248. *(p. 146)*

Bird, G. A. (1994). Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows. *Oxford Science Publications*, 42. *(p. 90)*

Blanchard, G., Villedieu, P., and Zuzio, D. (2013). Numerical simulation of primary atomization of a sheared liquid sheet. part 1 : model and numerical method description. *Conference ILASS, Europe 2013, 25th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems.* 1-4 September 2013, Chania, Greece. *(p. 65)*

Boileau, M., Chalons, C., and Massot, M. (2015). Robust numerical coupling of pressure and pressureless gas dynamics equations for Eulerian spray DNS and LES. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 37 :B79–B102. *(p. 4, 153)*

Bouchut, F., Jin, S., and Li, X. (2003). Numerical approximations of pressureless and isothermal gas dynamics. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 41(1) :135–158. *(p. 153, 177)*

Bourasseau, B. (1986). Programme de calcul des performances des systèmes propulsifs COPPELIA, 1ère partie : description théorique. Rapport technique ONERA RT5/3589 EY. *(p. 52)*

Bourasseau, S. (1980). Instabilités de haute fréquence dans les moteurs-fusées à propergol liquide : étude documentaire. Rapport technique ONERA RT5/6108 EY. *(p. 24)*

Brooks, K. P. and Beckstead, M. W. (1995). Dynamics of aluminum combustion. *Journal of Propulsion and Power*, 11(4) :769–780. *(p. 44, 50)*

Brown, R. S., Dunlap, R., Young, S. W., and Waugh, R. C. (1981). Vortex shedding as a source of acoustic energy in segmented solid rockets. *Journal of Spacecraft and Rockets*, 18(4) :312–319. *(p. 25)*

Brulard, J. (1967). Contribution à l'étude de la combustion des particules d'aluminium. *La Recherche Aerospatiale*, 118 :25–49. *(p. 35)*

Bruyat, A. (2012). *Influence de l'évaporation de gouttes multicomposant sur la combustion et des effets diphasiques sur l'allumage d'un foyer aéronautique.* Thèse de l'ISAE. *(p. 122)*

Brzustowski, T. A. and Glassman, I. (1964). Vapor phase diffusion flames in the combustion of magnesium and aluminum : I. analytical developments in H.G. Wolfard, I. Glassman, and L. Green (eds). *Heterogeneous Combustion*, 15 :75–115. New-York : Academic Press. *(p. 50)*

Bucher, P., Yetter, R. A., Dryer, F. L., Vicenzi, E. P., Parr, T. P., and Hanson-Parr, D. M. (1999). Condensed-phase species distribution about Al particles reacting in various oxidizers. *Combustion and Flame*, 117(1-2) :351–361. *(p. 33)*

Buffard, T. and Clain, S. (2010). Monoslope and multislope MUSCL methods for unstructured meshes. *Journal of Computational Physics*, 229(10) :3745–3776. *(p. 153)*

Burakov, V. A. and Sandu, S. F. (1997). Mathematical modeling of the dynamics of slagging and thermochemical destruction of carbon composite thermal protective materials in high-temperature two-phase flow. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 33(4) :472–481. *(p. 23)*

Bürgers, J. (1948). A mathematical model illustrating the theory of turbulence. *Advances in Applied Mechanics*, 1 :171–199. *(p. 148)*

Cai, W., Thakre, P., and Yang, V. (2008). A model of AP/HTPB composite propellant combustion in rocket-motor environments. *Combustion Science and Technology*, 180(12) :2143–2169. *(p. 18)*

Candel, S. (1990). *Mécanique des fluides*. Seconde édition, Dunod. *(p. 15)*

Capecelatro, J. and Desjardins, O. (2013). An Euler-Lagrange strategy for simulating particle-laden flows. *Journal of Computational Physics*, (238) :1–31. *(p. 3, 75, 91)*

Capecelatro, J., Desjardins, O., and Fox, R. O. (2014). Numerical study of collisional dynamics in cluster-induced turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 747 :1–13. *(p. 73)*

Casalis, G. (1998). Stabilité linéaire d'un écoulement dans un conduit à parois débitantes en géométrie cartésienne. Rapport technique ONERA RF 114/5118.25 DERAT. *(p. 26)*

Castella, F., Chartier, P., Descombes, S., and Vilmart, G. (2009). Splitting methods with complex times for parabolic equations. *BIT Numerical Mathematics*, 49(3) :487–508. *(p. 143)*

Cesco, N. (1997). *Etude et modélisation de l'écoulement diphasique à l'intérieur des propulseurs à poudre*. Thèse de l'ENSAE. *(p. 23, 50, 51)*

Chalons, C., Massot, M., and Vié, A. (2015). An asymptotic preserving numerical scheme for the large eddy simulation of disperse phase flows. *SIAM Journal on Multiscale Modeling and Simulation*, 13 :291–315. Available on http ://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00958108. *(p. 69)*

Chanteperdrix, G., Villedieu, P., and Vila, J. P. (2002). A compressible model for separated two-phase flow computations. *ASME Fluids Engineering Division Summer Meeting*, 31141. *(p. 93)*

Chassagne, F. (2007). *Contribution à la modélisation de la combustion de blocs de propergol solide aluminisé après éclatement d'un propulseur*. Thèse de l'Université de Poitiers. *(p. xvii, 34)*

Chedevergne, F. (2007). *Instabilités intrinsèques des moteurs à propergol solide*. Thèse de l'ENSAE. *(p. xvii, 26, 28, 227)*

Clauzon, V. (2008). *Analyse de schémas d'ordre élevé pour les écoulements compressibles. Application à la simulation numérique d'une torche à plasma.* Thèse de l'Université Blaise-Pascal. *(p. 153)*

Cockburn, B. (2001). Devising Discontinuous Galerkin methods for non-linear hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 128(1–2) :187–204. *(p. 152)*

Cohen, N. S. (1983). A pocket model for aluminum agglomeration in composite propellants. *AIAA Journal*, 21(5) :720–725. *(p. 17, 32)*

Courbet, B., Benoit, C., Couaillier, V., Haider, F., Le Pape, M. C., and Péron, S. (2011). Space discretization methods. *Aerospace Lab*, 2 :1–14. Available at www.aerospacelab-journal.org/al2. *(p. 196)*

Creta, F., Attili, A., Favini, B., and Di Giacinto, M. (2008). Two approaches for condensed-phase modeling in solid rocket motor flows. AIAA PAPER 2008-4789*, 44th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*. 21-23 July 2008, Hartford, CT. *(p. 91)*

Crouzeix, M. (1980). Une méthode multipas implicite-explicite pour l'approximation des équations d'évolution paraboliques. *Numerische Mathematik*, 35(3) :257–276. *(p. 5, 141)*

Crowe, C. T., Sommerfeld, M., and Tsuji, Y. (1998). *Multiphase flows with droplets and particles*. CRC Press. *(p. xviii, 68, 69, 77, 90)*

Culick, F. E. C. (1966). Rotational axisymmetric mean flow and damping of acoustic waves in a sloid propellant rocket. *AIAA Journal*, 4(8) :1462–1464. *(p. 26)*

Culick, F. E. C. and Magiawala, K. (1979). Excitation of acoustic modes in a chamber by vortex shedding. *Journal of Sound and Vibration*, 64(3) :455–457. *(p. 28)*

Daniel, E. (2000). Eulerian approach for unsteady two-phase solid rocket flows with aluminum particles. *Journal of Propulsion and Power*, 16(2) :309–317. *(p. 50, 53, 150)*

Daniel, E., Saurel, R., Larini, M., and Loraud, J. C. (1993). A comparison between centered and upwind schemes for two-phase compressible flows. AIAA PAPER 1993-2346*, 29th AIAA/SAE/ASME/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*. June 1993, Monterey, CA. *(p. 150, 153)*

Daru, V. and Tenaud, C. (2004). High order one-step monotonicity-preserving schemes for unsteady compressible flow calculations. *Journal of Computational Physics*, 193(2) :563–594. *(p. 150, 151)*

Davenas, A. (1989). *Technologie des propergols solides*. Davenas and Co., Edition Masson. *(p. 17)*

Davidenko, D. and Fabignon, Y. (2013). Modeling of heterogeneous structure and properties of composite solid propellants. *5th European Conference for Aeronautics and Space Sciences, EUCASS*, pages 1–12. 1-5 July 2013, Munich, Germany. *(p. xvii, 33)*

de Chaisemartin, S. (2009). *Polydisperse evaporating spray turbulent dispersion : Eulerian model and numerical simulation*. Thèse de l'Ecole Centrale Paris. TEL : https ://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00443982. *(p. 4, 69, 90, 91, 92, 96, 153, 155)*

Derksen, J. J. (2012). Dense suspensions – solid-liquid interactions at the particle scale. *Progress in Computational Fluid Dynamics*, 12(2-3) :103–111. *(p. 73)*

Descombes, S., Duarte, M., Dumont, T., Guillet, T., Louvet, V., and Massot, M. (2015). Task-based adaptive multiresolution for time-space multi-scale reaction-diffusion systems on multi-core architectures. Available on https ://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01148617. *(p. 200)*

Descombes, S. and Massot, M. (2004). Operator splitting for nonlinear reaction-diffusion systems with an entropic structure : singular perturbation and order reduction. *Numerische Mathematik*, 97(4) :667–698. *(p. 145, 185)*

DesJardin, P. E., Felske, J. D., and Carrara, M. D. (2005). Mechanistic model for aluminum particle ignition and combustion in air. *Journal of Propulsion and Power*, 21(3) :478–485. *(p. 50)*

Desjardins, O., Moureau, V., and Pitsch, H. (2008). An accurate conservative level set/-ghost fluid method for simulating turbulent atomization. *Journal of Computational Physics*, 227(18) :8395–8416. *(p. 64)*

Despres, B. and Dubois, F. (2005). *Systèmes hyperboliques de lois de conservation. Application à la dynamique des gaz*. Les Editions de l'Ecole Polytechnique. *(p. 148)*

Devassy, B. M., Habchi, C., and Daniel, E. (2013). A new atomization model for high speed liquid jets using a turbulent, compressible, two-phase flow model and a surface density approach. *Conference ILASS, Europe 2013, 25th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems*. 1-4 September 2013, Chania, Greece. *(p. 66)*

Devassy, B. M., Habchi, C., and Daniel, E. (2015). Atomization modelling of liquid jets using a two-surface density approach. *Atomization and Sprays*, 25(1) :47–80. *(p. 66)*

Devesvre, J. (2011). *Sur la compréhension des phénomènes de couplage fluide-structure dans les propulseurs à poudre*. Thèse de l'Université de Provence-Aix Marseille. *(p. 29)*

Doisneau, F. (2013). *Modeling and simulation of polydisperse moderately dense coalescing spray flows with nanometric-to-inertial droplets : application to Solid Rocket Motors*. Thèse de l'Ecole Centrale Paris. *(p. xvii, 2, 4, 5, 36, 71, 77, 89, 98, 99, 102, 103, 135, 142, 203)*

Doisneau, F., Laurent, F., Murrone, A., Dupays, J., and Massot, M. (2013). Eulerian multi-fluid models for the simulation of dynamics and coalescence of particles in solid propellant combustion. *Journal of Computational Physics*, 234 :230–262. *(p. 4, 5, 93, 98, 102, 106, 111, 142)*

Doisneau, F., Sibra, A., Dupays, J., Murrone, A., Laurent, F., and Massot, M. (2014). Numerical strategy for unsteady two-way coupled polydisperse sprays : application to solid-rocket instabilities. *Journal of Propulsion and Power*, 30(3) :727–748. *(p. 5, 6, 41, 115, 116, 141, 142, 198, 199)*

Doisneau, F., Thomine, O., Laurent, F., Vié, A., Dupays, J., and Massot, M. (2012). Eulerian modelling and simulation of small scale trajectory crossing and coalescence for moderate-Stokes-number spray flows. *Proceedings of the Summer Program 2012, Center for Turbulence Research*, pages 365–374. *(p. 2, 91, 249)*

Dotson, K. W. and Sako, B. H. (2004). An investigation of propulsion-structure interaction in solid rocket motors. AIAA PAPER 2004-4183*, 40th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*. 11-14 July 2004, Fort Lauderdale, FL. *(p. 29)*

Dreizin, E. L. (1999). On the mechanism of asymmetric aluminum particle combustion. *Combustion and Flame*, 117(4) :841–850. *(p. 34)*

Drew, D. A. and Passman, S. L. (1999). *Theory of multicomponent fluids*, volume 135. Applied Mathematical Sciences, Springer 1999. *(p. 93)*

Drui, F. (2017). *Modélisation Eulérienne des écoulements diphasiques à phases séparées et dispersées : développement d'une modélisation unifiée et de schémas numériques adaptés aux architecture paralléles*. Thèse de l'Université Paris-Saclay Centrale-Supélec. *(p. 65)*

Duarte, M. (2011). *Méthodes numériques adaptatives pour la simulation de la dynamique de fronts de réaction multi-échelles en temps et en espace*. Thèse de l'Ecole Centrale Paris. *(p. 5, 142, 143, 204)*

Duarte, M., Descombes, S., Tenaud, C., Candel, S., and Massot, M. (2013). Time–space adaptive numerical methods for the simulation of combustion fronts. *Combustion and Flame*, 160(6) :1083–1101. *(p. 142)*

Duarte, M., Massot, M., Descombes, S., Tenaud, C., Dumont, T., Louvet, V., and Laurent, F. (2011). New resolution strategy for multi-scale reaction wave using time operator splitting, space adaptative multiresolution and dedicated high order implicit/explicit time integrators. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 34(1) :A76–A104. *(p. 5, 142, 143)*

Dufour, G. (2005). *Modélisation Multi-Fluide eulérienne pour les écoulements diphasiques à inclusions dispersées*. Thèse de l'Université Paul Sabatier Toulouse III. *(p. 4, 5, 98, 102, 105, 106, 131, 155)*

Dukowicz, J. K. (1980). A particle-fluid numerical model for liquid sprays. *Journal of Computational Physics*, 35(2) :229–253. *(p. 74)*

Dupays, J. (1996). *Contribution à l'étude du rôle de la phase condensée dans la stabilité d'un propulseur à propergol solide pour lanceur spatial*. Thèse de l'Institut National Polytechnique de Toulouse. *(p. 25, 39, 150, 152)*

Dupays, J. (2002a). Mass transfer effects on sound propagation in a droplet-gas mixture. *Combustion of Energetic Materials*, pages 652–661. Edited by K.K. Kuo and L. T. Deluca, Begell House Inc. *(p. xviii, 41)*

Dupays, J. (2002b). Two-phase unsteady flow in solid rocket motors. *Aerospace Science and Technology*, 6(6) :413–422. *(p. xviii, 1, 42, 43, 223)*

Dupays, J. (2009). Synthèse sur la modélisation de la combustion des gouttes d'aluminium. Rapport technique ONERA RT 9/14116 DEFA. *(p. xviii, 32, 53)*

Dupays, J. (2013). Une approche multiespèce simplifiée pour modéliser la combustion des gouttes d'aluminium. Rapport technique ONERA RT 1/19861 DEFA. *(p. 53, 58, 61, 208)*

Dupays, J. and Fabignon, Y. (2002). Programme SPADA. simulations numériques de l'écoulement diphasique instationnaire dans le MPS P230 d'ARIANE 5 et le moteur à échelle $1/15^{\text{ème,}}$ LP6. Rapport technique ONERA RT 1/06316. *(p. 42)*

Dupays, J., Fabignon, Y., Villedieu, P., Lavergne, G., and Estivalezes, J. L. (2000). Some aspects of two-phase flows in solid-propellant rocket motors. In *Solid Propellant Chemistry, Combustion, and Motor Interior Ballistics*, volume 185 of *Progress in Astronautics and Aeronautics*, pages 859–883. edited by V. Yang, T.B. Brill and W.-Z. Ren. *(p. 23, 36)*

Dupays, J., Godfroy, F., Orlandi, O., Prévot, P., Prévost, M., Gallier, S., Ballereau, S., and Fabignon, Y. (2008). Inert condensed phase driving effect of combustion instabilities in Solid Rocket Motor, Space Propulsion 2008. 5-9 May 2008, Heraklion, Greece. *(p. 40)*

Dupays, J., Prévost, M., Tarrin, P., and Vuillot, F. (1996). Effects of particulate phase on vortex shedding driven oscillations in solid rocket motors. AIAA PAPER 1996-3248*, 32nd AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*. 1-3 July 1996, Lake Buena Vista, FL. *(p. 23, 39, 159)*

Dupays, J. and Vuillot, F. (2002). Propagation of acoustic waves in a two-phase vaporizing mixture. *Journal of Propulsion and Power*, 18(1) :222–224. *(p. xviii, 40, 41, 113, 115)*

Dupif, V. (2017). *Modélisation et simulation de l'écoulement diphasique dans les moteurs à propergol solide par une approche eulérienne polydisperses en taille et en vitesse*. Thèse de l'Université Paris-Saclay Centrale-Supélec. *(p. 91, 97, 150, 205, 246, 249)*

Dupif, V., Dupays, J., Laurent, F., Le Touze, C., and Massot, M. (2015a). Eulerian models and related numerical schemes and parallel implementation for the simulation of polydisperse two-phase flows in solid rocket motors. *SimRace 2015 – Numerical methods and high performance computing for industrial fluid flows*. 8-10 décembre 2015, IFPEN, Rueil-Malmaison. *(p. 200, 249)*

Dupif, V., Massot, M., Dupays, J., Laurent, F., and Le Touze, C. (2015b). Influence of numerical methods on the simulation of the steady and unsteady two-phase flow in solid rocket motors. *6th European Conference for Aeronautics and Space, EUCASS*. 29 June - 3 July 2015, Krakow, Poland. *(p. 71, 150, 153)*

Duterque, J., Hilbert, R., and Lengellé, G. (1999). Agglomération et combustion de l'aluminium dans les propergols solides. Rapport technique ONERA RT 3/6274/DMAE/Y/DEFA. *(p. 31, 32, 34)*

Elghobashi, S. (1994). On predicting particle-laden turbulent flows. *Applied Scientific Research*, 52 :309–329. *(p. xviii, 68)*

Emre, O. (2014). *Modeling of spray polydispersion with two-way turbulent interactions for high pressure direct injection in engines*. Thèse de l'Ecole Centrale Paris. Available on https ://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01089937. *(p. 65, 102, 148, 204)*

Ern, A. and Giovangigli, V. (1994). *Multicomponent transport algorithms*. Springer-Verlag, Berlin. *(p. 78)*

Evans, G. I. and Smith, P. K. (1979). The suppression of combustion instability by particulate damping in smokless solid propellant motors. *Solid Rocket Motor Technology*, AGARD CP-259. *(p. 24)*

Fabignon, Y. (1997). Synthèse de l'activité MACADAM - modélisation du dépôt dans le MPS P230. Rapport technique ONERA RT 89/6133 EY. *(p. 23)*

Fabignon, Y., Dupays, J., Avalon, G., Vuillot, F., Lupoglazoff, N., Casalis, G., and Prévost, M. (2003a). Instabilities and pressure oscillations in solid rocket motors. *Aerospace Science and Technology*, 7(3) :191–200. *(p. 25)*

Fabignon, Y., Orlandi, O., Trubert, J. F., Lambert, D., and Dupays, J. (2003b). Combustion of aluminum particles in solid rocket motors. AIAA Paper 2003-4807*, 39th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*. 20-23 July 2003, Huntsville, AL. *(p. xvii, 35)*

Fede, P. and Simonin, O. (2006). Numerical study of the subgrid fluid turbulence effects on the statistics of heavy colliding particles. *Physics of Fluids*, 18(4) :1–17. *(p. 74)*

Feraille, F. (2004). *Instabilités de l'écoulement interne des moteurs à propergol solide*. Thèse de l'ENSAE. *(p. 40)*

Ferretti, V., Favini, B., Cavallini, E., Serraglia, F., and Di Giacinto, M. (2011). Pressure oscillations simulation in P80 SRM first stage VEGA launcher. AIAA paper 2011-6055*, 47th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exihit*, pages 1–14. 31 July - 3 August 2011, San Diego, CA. *(p. 45)*

Flandro, G. A. (1986). Vortex driving mechanism in oscillatory rocket flows. *Journal of Propulsion and Power*, 2(3) :206–214. *(p. 25, 27)*

Flandro, G. A. (1995). Effects of vorticity on rocket combustion stability. *Journal of Propulsion and Power*, 11(4) :607–625. *(p. 45)*

Flandro, G. A. and Majdalani, J. (2003). Aeroacoustic instability in rockets. *AIAA Journal*, 41(3) :485–497. *(p. 45)*

Flandro, G. A. et Jacobs, H. R. (1973). Vortex generated sound in cavities. AIAA paper 1973-1014*, Aero-Acoustics Conference*. 15-17 October 1973, Seattle, WA. *(p. 25, 27)*

Flatau, A. and VanMoorhem, W. K. (1990). Prediction of vortex shedding responses in segmented solid rocket motors. AIAA paper 1990-2073*, 26th Joint Propulsion Conference*. 16-18 July 1990, Orlando, FL. *(p. 25)*

Fox, R. O. (2012). Large-eddy-simulation tools for multiphase flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 44 :47–76. *(p. 77)*

Fox, R. O., Laurent, F., and Massot, M. (2008). Numerical simulation of spray coalescence in an Eulerian framework : direct quadrature method of moments and Multi-Fluid method. *Journal of Computational Physics*, 227(6) :2215–2222. *(p. 4, 92)*

Frayssac, J. and Barrere, S. (1961). Contribution à l'étude de la combustion des particules métalliques. Rapport technique ONERA NT 11/3361 EY. *(p. 50)*

Fuster, D., Bagué, A., Boeck, T., Le Moyne, L., Leboissetier, A., Popinet, S., Ray, P., Scardovelli, R., and Zaleski, S. (2009). Simulation of primary atomization with an octree adaptative mesh refinement and VOF method. *International Journal of Multiphase flow*, 35(6) :550–565. *(p. 64)*

Gallier, S. (2011). Heterogeneous solid propellants : from microstructure to macroscale properties. *Progress in Propulsion Physics*, 2 :21–34. *(p. 33)*

Gallier, S. and Godfroy, F. (2009). Aluminum combustion driven instabilities in solid rocket motors. *Journal of Propulsion and Power*, 25(2) :509–521. *(p. 1, 4, 45, 56, 95)*

Gallier, S., Godfroy, F., and Plourde, F. (2004). Computational study of turbulence in a subscale solid rocket motor. AIAA paper 2004-4052*, 40th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*. 11-14 July 2004, Fort Lauderdale, FL. *(p. 29)*

Gallier, S., Guéry, J.-F., Godfroy, F., Le Breton, P., Ribereau, D., and Cloutet, P. (2002). Instabilités de fonctionnement dans les moteurs à propergol solide de grande taille. *Revue Scientifique et Technique de la Défense*, 57 :45–55. *(p. 25)*

Gallier, S., Kratz, J.-G., Quaglia, N., Fouin, G., Cesco, N., and Robert, E. (2013). Detailed analysis of a quench bomb for the study of aluminum agglomeration in solid propellants. *5th European Conference for Aeronautics and Space Sciences (EUCASS)*. 1-5 July 2013, Munich, Germany. *(p. xvii, 36)*

Gallier, S., Radenac, E., and Godfroy, F. (2009). Thermoacoustic instabilities in solid rocket motors. AIAA paper 2009-5252*, 45th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*. 2-5 August 2009, Denver, CO. *(p. 45)*

Gazanion, B., Chedevergne, F., de Saint-Victor, X., Estivalezes, J.-L., and Casalis, G. (2013). Laminar-turbulent transition investigation in a solid rocket motor representative cold flow setup. AIAA PAPER 2013-3918, *49th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference*. 14-17 July 2013, San Jose, CA. *(p. 29)*

Giovangigli, V. (1999). *Multicomponent flow modeling*. Birkhäuser Boston Inc., Boston, MA. *(p. 78)*

Giovangigli, V. and Massot, M. (1998). Asymptotic stability of equilibrium states for multicomponent reactive flows. *Mathematical Models & Methods in Applied Sciences*, 8(2) :251–297. *(p. 78)*

Glotov, O. G., Onischuk, A. A., Karasev, V. V., Zarko, V. E., and Baklanov, A. M. (2007). Size and morphology of the nanooxide aerosol generated by combustion of an aluminum droplet. *Doklady Physical Chemistry*, 413(1) :59–62. *(p. 35)*

Godfroy, F. and Guéry, J.-F. (1997). Unsteady Eulerian two-phase flow analysis of solid rocket motor slag. AIAA PAPER 1997-2859, *33rd AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*. 6-9 July 1997, Seattle, WA. *(p. 23, 36)*

Godon, J.-C. (1983). *Modélisation de la combustion normale et érosive des propergols composites*. Thèse de l'Université Pierre et Marie Curie, Paris 6. *(p. xvii, 18)*

Goncalves de Miranda, F. (2000). *Etude numérique de l'écoulement instationnaire diphasique dans les propulseurs à propergol solide d'Ariane 5*. Thèse de l'ENSAE. *(p. 25)*

Gossé, S. (2004). *Caractérisations morphologiques et radiatives des alumines issues de la combustion de propergol, Application au transfert radiatif dans les jets*. Thèse de l'Université d'Orléans. *(p. 23)*

Gottlieb, S. and Shu, C. W. (1998). Total variation diminishing Runge-Kutta schemes. *Mathematics of Computation*, 67(221) :73–85. *(p. 159)*

Greenberg, J. B., Silverman, I., and Tambour, Y. (1993). On the origins of spray sectional conservation equations. *Combustion and Flame*, 93(1-2) :90–96. *(p. 4, 96)*

Griffond, J. (2001). *Instabilité pariétale et accrochage aéro-acoustique dans les conduits à parois débitantes simulant les moteurs à propergol solide d'Ariane 5*. Thèse de l'ENSAE. *(p. 26, 29)*

Griffond, J., Casalis, G., and Pineau, J.-P. (2000). Spatial instability of flow in a semi-infinite cylinder with fluid injection through its porous walls. *European Journal of Mechanics - B/-Fluids*, 19(1) :69–87. *(p. 26)*

Guéry, J.-F., Vuillot, F., Avalon, G., Plourde, F., Anthoine, J., and Platet, B. (2000). Use of cold flow experiments in the ASSM program - lessons and results. *2nd European Conference on Launcher Technology, Space Solid Propulsion*. 21-24 November 2000, Rome, Italy. *(p. 27)*

Habiballah, M., Vingert, L., Traineau, J. C., and Vuillermoz, P. (1996). MASCOTTE, a test bench for cryogenic combustion research. *47th International Astronautical Congress*. 7-11 October 1996, Beijing, China. *(p. 203)*

Haider, F. (2009). *Discrétisation en maillage non structuré général et applications LES*. Thèse de l'Université Pierre et Marie Curie-Paris 6. *(p. 152, 196)*

Haider, F., Bertier, N., Courbet, B., Vuillot, F., and Croisille, J. P. (2014). Application of a high order finite volume scheme on unstructured grids to fluid dynamics and aerothermochemistry. *Submitted to International Journal for Numerical Methods in Fluids*. Available on https ://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01111360/. *(p. 152)*

Hairer, E. and Wanner, G. (1996). *Solving ordinary differential equations. II*. Stiff and differential-algebraic problems, second revised edition, Springer-Verlag, Berlin. *(p. 142, 177)*

Hansen, E. and Ostermann, A. (2009). High order splitting methods for analytic semigroups exist. *BIT Numerical Mathematics*, 49(3) :527–542. *(p. 143)*

Harrje, D. T. and Reardon, F. H. (1972). Liquid propellant rocket combustion instability. Technical Report SP-194, NASA. *(p. 24, 47)*

Hermsen, R. (1981a). Aluminum combustion efficiency in solid rocket motor. AIAA PAPER 1981-0038, *19th Aerospace Sciences Meeting*. 12-15 January 1981, St Louis, MO. *(p. 51)*

Hermsen, R. (1981b). Aluminum oxide particle size for solid rocket motor performance prediction. *Journal of Spacecraft and Rockets*, 18(6) :483–490. *(p. 36)*

Herrmann, M. (2008). A balanced force refined level set grid method for two-phase flows on unstructured flow solver grids. *Journal of Computational Physics*, 227(4) :2674–2706. *(p. 64)*

Hesthaven, J. S. and Warburton, T. (2008). *Nodal Discontinuous Galerkin Methods: Algorithms, Analysis, and Applications*. Springer Texts in Applied Mathematics 54, Springer Verlag, New York. *(p. 150, 152)*

Hu, C. and Shu, C.-W. (1999). Weighted essentially non-oscillatory schemes on triangular meshes. *Journal of Computational Physics*, 150 :97–127. *(p. 151)*

Huang, Y., Risha, G. A., Yang, V., and Yetter, R. A. (2007). Combustion of bimodal nano/micron-sized aluminum particle dust in air. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31 :2001–2009. *(p. xviii, 51, 52)*

Hundsdorfer, W. and Verwer, J. G. (2003). *Numerical Solution of Time-Dependent Advection-Diffusion-Reaction Equations*. Springer-Verlag, Berlin. *(p. 5, 142)*

Hylkema, J. J. (1999). *Modélisation cinétique et simulation numérique d'un brouillard dense de gouttelettes. Application aux propulseurs à poudre*. Thèse de l'ENSAE. *(p. 90)*

Ishii, M. (1975). *Thermo-fluid dynamic theory of two-phase flow*. Eyrolles, Paris. *(p. 2, 63)*

Jameson, A. (1995). 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 :171–218. RIACS Technical Report 94.15. *(p. 150)*

Jameson, A., Schmidt, W., and Turkel, E. (1981). Numerical solution of the euler equations by finite volume methods using runge-kutta time-stepping schemes. AIAA PAPER 1981-1259. *(p. 150)*

Kah, D. (2010). *Taking into account polydispersity for the modeling of liquid fuel injection in internal combustion engines*. Thèse de l'Ecole Centrale Paris. Available on TEL https ://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00618786. *(p. 4, 65, 102, 148, 153, 156)*

Kah, D., Laurent, F., Massot, M., and Jay, S. (2012). A high order moment method simulating evaporation and advection of a polydisperse liquid spray. *Journal of Computational Physics*, 231(2) :394–422. *(p. 5, 98, 101, 102, 148, 153)*

Karasev, V. V., Onishchuk, A. A., Khromova, S. A., Glotov, O. G., Zarko, V. E., Pilyugina, E. A., and Tsai, C. J. (2006). Formation of metal oxide nanoparticles in combustion of titanium and aluminum droplets. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 42(6) :649–662. *(p. 35)*

King, M. K. (1977). Modeling of single particle aluminum combustion. Report AFOSR-TR-78-0060. *(p. 51)*

King, M. K. (1979). Modeling of single particle aluminum combustion in CO2-N2 atmospheres. *Symposium International on Combustion*, 17(1) :1317–1328. *(p. 51)*

Kovalev, O. B. (2002a). Motor and plume particle size prediction in solid-propellant rocket motors. *Journal of Propulsion and Power*, 18(6) :1199–1210. *(p. 23)*

Kovalev, O. B. (2002b). Prediction of the size of aluminum-oxide particles in exhaust plumes of solid rocket motors. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 38(5) :535–546. *(p. 36)*

Kubota, N. (2002). *Propellants and explosives : thermochemical aspects of combustion*. Wiley-VCH Verlag GmbH and Co., Weinheim, Allemagne. *(p. 17)*

Kuehl, D. K. and Zwillenberg, M. L. (1968). Prediction of burning times of metal particles. AIAA PAPER 1968-494*, 3rd Solid Propulsion Conference*. 4-6 June 1968, Atlantic City, NJ. *(p. 50)*

Kuentzmann, P. (1973a). Formation de la phase condensée dans un moteur à propergol solide métallisé. Note technique ONERA NT 210. *(p. xvii, 33, 34)*

Kuentzmann, P. (1973b). Pertes d'impulsion spécifique dans les fusées à propergol solide. Thèse de l'Université Paris 6. *(p. 23)*

Kuentzmann, P. (1991). *Instabilités de combustion*. Combustion of Solid Propellants, AGARD LS-180. *(p. 45)*

Kuentzmann, P. (1995). Instabilités de fonctionnement des systèmes propulsifs. *La Recherche Aérospatiale*, 5 :341–351. *(p. 25)*

Lamarque, N. (2007). *Schémas numériques et conditions limites pour la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique dans les foyers d'hélicoptère*. Thèse de l'Institut National Polytechnique de Toulouse. *(p. 149)*

Larat, A., Massot, M., and Vié, A. (2012). A stable, robust and high order accurate numerical method for Eulerian simulation of spray and particle transport on unstructured meshes. *Annual Research Briefs, Center for Turbulence Research*, pages 205–216. *(p. 154)*

Laurent, F. (2002). *Modélisation mathématique et numérique de la combustion de brouillards de gouttes polydispersés*. Thèse de l'Université Claude Bernard, Lyon 1. Available at http ://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00185806/fr/. *(p. 5)*

Laurent, F. (2006). Numerical analysis of Eulerian Multi-Fluid models in the context of kinetic formulations for dilute evaporating sprays. *M2AN Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 40(3) :431–468. *(p. 5, 98, 102, 155)*

Laurent, F. and Massot, M. (2001). Multi-fluid modeling of laminar poly-dispersed spray flames : origin, assumptions and comparison of the sectional and sampling methods. *Combustion Theory and Modelling*, 5(4) :537–572. *(p. 4, 80, 83, 92, 95, 96, 98, 123)*

Laurent, F., Massot, M., and Villedieu, P. (2004a). Eulerian Multi-Fluid modeling for the numerical simulation of coalescence in polydisperse dense liquid sprays. *Journal of Computational Physics*, 194(2) :505–543. *(p. 4)*

Laurent, F., Santoro, V., Noskov, M., Smooke, M. D., Gomez, A., and Massot, M. (2004b). Accurate treatment of size distribution effects in polydisperse spray diffusion flames : multi-fluid modelling, computations and experiments. *Combustion Theory and Modelling*, 8(2) :385–412. *(p. 4, 80, 99, 106, 165)*

Laurent, F., Sibra, A., and Doisneau, F. (2015). Two-size moment Eulerian multi-fluid model : a flexible and realizable high-fidelity description of polydisperse moderately dense evaporating sprays. *Submitted, Communication in Computational Physics*, pages 1–42. HAL : https ://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01169730/en. *(p. 6, 102, 103, 107, 108, 109, 124, 131, 249)*

Law, C. K. (1973). A simplified theoretical model for the vapor-phase combustion of metal particles. *Combustion Science and Technology*, 7(5) :197–212. *(p. 50)*

Law, C. K. (2006). *Combustion physics*. Cambridge University Press. *(p. 60)*

Le Chenadec, V. (2012). *Development of a robust and conservative framework for primary atomization computations*. PhD thesis, Center for Turbulent Research, Stanford University. *(p. 64, 65)*

Le Chenadec, V. and Pitsch, H. (2013). A 3d unsplit forward/backward volume-of-fluid approach and coupling to the level set method. *Journal of Computational Physics*, 233 :10–33. *(p. 64)*

Le Martelot, S., Saurel, R., and Nkonga, B. (2014). Towards the direct numerical simulation of nucleate boiling flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 66 :62–78. *(p. 65)*

Le Touze, C. (2015). *Couplage entre modèles diphasiques à phases séparées et à phase dispersée pour la simulation de l'atomisation primaire en combustion cryotechnique*. Thèse de l'Université de Sophia Antipolis. *(p. xxi, 65, 66, 153, 154, 196, 201, 202, 203, 204, 250)*

Le Touze, C., Murrone, A., and Guillard, H. (2015). Multislope MUSCL method for general unstructured meshes. *Journal of Computational Physics*, 284 :389–418. *(p. 4, 6, 152, 153, 196, 198)*

Le Touze, C., Murrone, A., and Montreuil, E. (2013). Numerical coupling strategies for the separated-to-dispersed transition within the liquid phase of cryogenic rocket engines. 5th European Conference for Aeronautics and Space Sciences, (EUCASS). 1-5 July 2013, Munich, Germany. *(p. 95)*

Lebas, R., Menard, T., Beau, P. A., Berlemont, A., and Demoulin, F. X. (2009). Numerical simulation of primary break-up and atomization : DNS and modelling study. *International Journal of Multiphase Flows*, 35(3) :247–260. *(p. 64)*

Lerat, A. and Peyret, R. (1974). Noncentered schemes and shock propagation problems. *Computers and Fluids*, 2 :35–52. Pergamon Press. *(p. 150)*

Leterrier, N. (2003). *Discrétisation spatiale en maillage non-structuré de type général*. Thèse de l'Université Pierre et Marie Curie-Paris 6. *(p. 196)*

LeVeque, R. J. (1992). *Numerical methods for conservation laws*. Basel, Second edition, Birkhäuser Verlag. *(p. 148)*

LeVeque, R. J. (2004). *Finite-volume methods for hyperbolic problems*. Cambridge Texts in Applied Mathematics. Cambridge University Press, Cambridge. *(p. 148)*

Litrico, G., Leon Perez, L., Proulx, P., Gouriet, J.-B., and Rambaud, P. (2013). Controlled oxidation of aluminum nano and micro particles: modeling and validation. *5th European Conference for Aeronautics and Space Sciences, (EUCASS)*. 1-5 July 2013, Munich, Germany. *(p. 32)*

Lupoglazoff, N. and Vuillot, F. (1992). Numerical simulation of vortex shedding phenomenon in 2D test case solid rocket motors. AIAA PAPER 1992-0776*, 30th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*. 6-9 January 1992, Reno, NV. *(p. 25)*

Lupoglazoff, N. and Vuillot, F. (1996). Parietal vortex shedding as a cause of instability for long solid propellant motors - Numerical simulations and comparisons with firing tests. AIAA PAPER 1996-0761*, 34th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*. 15-18 January 1996, Reno, NV. *(p. 26)*

Lupoglazoff, N. and Vuillot, F. (1998). Conception, spécifications et calculs du cas test C3 pour la validation instationnaire des modèles physiques. *3ème colloque R&T sur les Ecoulements internes en propulsion solide*. 25-27 mars 1998, ENSMA-Futuroscope Poitiers. *(p. 25)*

Lupoglazoff, N., Vuillot, F., Dupays, J., and Fabignon, Y. (2002). Numerical simulations of the unsteady flow inside segmented solid-propellant motors with burning aluminum particles. AIAA paper 2002-0784*, 40th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit.* 14-17 January 2002, Reno, NV. *(p. xviii, 4, 42, 43, 44, 56, 95, 227, 229, 236, 237)*

Maggi, F., Bandera, A., and DeLuca, L. T. Approaching solid propellant heterogeneity for agglomerate size prediction. AIAA paper 2010-6751*, 46th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit.* 25-28 July 2010, Nashville, TN. *(p. 33)*

Maggi, F., Dossi, S., Reina, A., Fassina, M., and Deluca, L. T. (2013). Advanced aluminum powders for solid propellants. *5th European Conference for Aeronautics and Space Sciences, (EUCASS).* 1-5 January 2013, Munich, Germany. *(p. 31)*

Maggi, F., Stafford, S., Jackson, T. L., and Buckmaster, J. (2008). Nature of packs used in propellant modeling. *Physical Review E*, 77(046107). *(p. 33)*

Mahulikar, S. P., Sonawane, H. R., and Arvind Rao, G. (2007). Infrared signature studies of aerospace vehicles. *Progress in Aerospace Sciences*, 43(7-8) :218–245. *(p. 23)*

Majdalani, J., , and VanMoorhem, W. K. (1998). Improved time-dependent flowfield solution for solid rocket motors. *AIAA Journal*, 36(2) :241–248. *(p. 45)*

Marchisio, D. L. and Fox, R. O. (2005). Solution of population balance equations using the direct quadrature method of moments. *Journal of Aerosol Science*, 36(1) :43–73. *(p. 4, 92)*

Marchisio, D. L. and Fox, R. O. (2013). *Computational models for polydisperse particulate and multiphase systems.* Cambridge University Press. *(p. 77)*

Marchisio, D. L., Vigil, R. D., and Fox, R. O. (2003). Quadrature method of moments for aggregation-breakage processes. *Journal of Colloid and Interface Science*, 258(2) :322–334. *(p. 92)*

Mashayek, R., Jaberi, F. A., Miller, R. S., and Givi, P. (1997). Dispersion and polydispersity of droplets in stationary isotropic turbulence. *International Journal of Multiphase Flow*, 23(2) :337–355. *(p. 74)*

Masi, E. (2010). *Étude théorique et numérique de la modélisation instationnaire des écoulements turbulents anisothermes gaz-particules par une approche Euler-Euler.* Thèse de l'Institut National Polytechnique de Toulouse. *(p. 4)*

Masson, D. R., Morstadt, R. A., Cannon, S. M., Gross, E. G., and Nielsen, D. B. (2004). Pressure oscillations and structural vibrations in space shuttle RSRM and ETM-3 motors. AIAA 2004-3898*, 40th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit.* 11-14 July 2004, Fort Lauderdale, FL. *(p. 29)*

Massot, M. (1996). *Modélisation Mathématique et Numérique de la Combustion des Mélanges Gazeux.* Thèse de l'Ecole Polytechnique. *(p. 78)*

Massot, M. (2007). *Eulerian Multi-Fluid models for polydisperse evaporating sprays*, chapter III of "Multi-Phase Reacting Flows : Modelling and Simulation", pages 79–123. CISM Courses and Lectures No. 492. Springer. Editors D. L. Marchisio and R. O. Fox,. *(p. 69)*

Massot, M., Kumar, M., Gomez, A., and Smooke, M. D. (1998). Counterflow spray diffusion flames of heptane : computations and experiments. *In Proceedings of the 27th Symposium International on Combustion, The Comb. Institute*, pages 1975–1983. *(p. 4)*

Massot, M., Laurent, F., de Chaisemartin, S., Fréret, L., and Kah, D. (2009). Eulerian Multi-Fluid models : modeling and numerical methods. In *Modelling and Computation of Nanoparticles in Fluid Flows*, Lectures of the von Karman Institute, pages 1–86. NATO RTO AVT 169. *(p. 69, 153)*

Massot, M., Laurent, F., Kah, D., and de Chaisemartin, S. (2010a). A robust moment method for evaluation of the disappearance rate of evaporating sprays. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 70(8) :3203–3234. *(p. 5, 98, 101, 102, 156, 164)*

Massot, M., Laurent, F., Kah, D., and de Chaisemartin, S. (2010b). A robust moment method for evaluation of the disappearance rate of evaporating sprays. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 70(8) :3203–3234. *(p. 148)*

Mathiaud, J. (2006). *Etude de systèmes de type gaz-particules.* Thèse de l'Ecole Normale Supérieure de Cachan. *(p. 67)*

Meinkohn, D. (2000). Metal combustion modelling. *2nd ONERA/DLR Aerospace Symposium.* 15-16 June 2000, Berlin, Germany. *(p. 33)*

Melcher, J. C., Burton, R. L., and Krier, H. (2000). Combustion of aluminum particles in solid-rocket-motor flows. In *Solid Propellant Chemistry Combustion and Motor Interior Ballistics*, volume 185 of *Progress in Astronautics and Aeronautics*, pages 723–747. edited by V. Yang, T.B. Brill and W.-Z. Ren. *(p. xvii, 34)*

Menard, T., Tanguy, S., and Berlemont, A. (2007). Coupling level set/vof/ghost fluid methods : Validation and application to 3d simulation of the primary break-up of a liquid jet. *International Journal of Multiphase Flow*, 33(5) :510–524. *(p. 64)*

Merzhanov, A. G. (1975). Thermal theory of metal particle ignition. *AIAA Journal*, 13(2) :209–214. *(p. 33)*

Miller, R. S. and Bellan, J. (2000). Direct numerical simulation and subgrid analysis of a transitional droplet laden mixing layer. *Physics of Fluids*, 12(3) :650–671. *(p. 74)*

Monaghan, J. (1992). Smoothed particle hydrodynamics. *Annual review of astronomy and astrophysics*, 30 :543–574. *(p. 64)*

Monavon, A. (2005). Approximation par tranche de l'écoulement compressible, diphasique et réactif dans un Etage d'Accélérateur à poudre (EAP). Technical report, Université Paris VI. *(p. 53)*

Murrone, A. and Guillard, H. (2005). A five equation reduced model for compressible two-phase flow problems. *Journal of Computational Physics*, 202(2) :664–698. *(p. 93)*

Murrone, A. and Villedieu, P. (2011). Numerical modeling of dispersed two-phase flows. *Aerospace Lab Journal*, 2 :1–13. Available at www.aerospacelab-journal.org/al2. *(p. 3, 4, 95)*

Najjar, F. M., Ferry, J. P., Haselbacher, A., and Balachandar, S. (2006). Simulations of solid-propellant rockets: Effects of aluminum droplet size distribution. *Journal of Spacecraft and Rockets*, 43(6) :1258–1270. *(p. 3, 227)*

Nomoto, H. and Culick, F. E. C. (1982). An experimental investigation of pure tone generation by vortex shedding in a duct. *Journal of Sound and Vibration*, 84(2) :247–252. *(p. 25)*

Orlandi, O. (2002). *Modélisation et simulation numérique de la combustion d'une goutte isolée d'aluminium*. Thèse de l'Université d'Orléans. *(p. xvii, 17, 48, 53)*

O'Rourke, P. J. (1981). *Collective drop effects on vaporizing liquid sprays*. PhD thesis, Los Alamos National Laboratory 87545, University of Princeton. *(p. 66, 74, 75, 90, 91)*

Osher, S. and Solomon, F. (1982). Upwind difference schemes for hyperbolic systems of conservation laws. *Mathematics of Computation*, 38(158) :339–374. *(p. 149)*

Pai, M. G. and Subramaniam, S. (2012). Two-way coupled stochastic model for dispersion of inertial particles in turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 700 :29–62. *(p. 74)*

Parr, T. P. and Hanson-Parr, D. M. (2006). AP/HTPB/Al propellant flame structure at 1 atm. NAWC Technical report. *(p. 32)*

Poinsot, T. and Veynante, D. (2005). *Theoretical and Numerical Combustion*. Second edition, Edwards, Philadelphia. *(p. 78)*

Popinet, S. and Zaleski, S. (1999). A front-tracking algorithm for accurate representation of surface tension. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 30(6) :775–793. *(p. 64)*

Pottier, N. (2007). *Physique statistique hors d'équilibre - Processus irréversibles linéaires*. EDP Sciences. *(p. 75)*

Prentice, J. L. (1970). Combustion of pulse-heated single particles of aluminum and beryllium. *Combustion Science and Technology*, 1(5) :385–398. *(p. 35)*

Prentice, J. L. (1974). Aluminum droplet combustion : rates and mechanisms in wet and dry oxydizers. Technical report 5569, Naval Weapons Center, China Lake, California, USA. *(p. 51)*

Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., and Flannery, B. P. (1992). *Numerical Recipes in Fortran 77*. The art of Scientific Computing, 2nd Edition, Cambridge University Press. *(p. 107)*

Prévost, M., Dommée, Y., Maunoury, J., Traineau, J. C., Vuillot, F., and Marion Duval, P. (2000a). On the representativity of small scale motor tests. *2nd European Conference on Launcher Technology, Space Solid Propulsion*. 21-24 November 2000, Rome, Italy. *(p. 26)*

Prévost, M., Godon, J.-C., and Innegraeve, O. (2005). Thrust oscillations in reduced scale solid rocket motors, part I : experimental investigations. AIAA PAPER 2005-4003, *41st AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*. 10-13 July 2005, Tucson, AZ. *(p. 27)*

Prévost, M., Jezequel, P., and Corato, C. (2013). Etude des oscillations de poussée - T11.3. synthèse de la base de données expérimentales instationnaires, version 8. Rapport technique ONERA RT 20/19330 DEFA/DMAE. *(p. xvii, 22)*

Prévost, M., Maunoury, J., and Prevot, P. (2000b). ASSM8 2ème campagne d'essai du montage LP9 démonstrateur du vortex-shedding pariétal (VSP). Rapport technique ONERA 9/6182/DSNA/DMAE. *(p. 27)*

Price, E. W. (1971). Comments on "role of aluminum in suppressing instability in solid propellant rocket motors". *AIAA Journal*, 9(5) :987–990. *(p. 39)*

Price, E. W. (1984). Experimental observations of combustion instability. *Fundamentals of solid propellant combustion*, volume 90 :733–789. edited by K. K. Kuo, M. Summerfield, Progress in Astronautics and Aeronautics, AIAA. *(p. 24)*

Price, E. W. and Sigman, R. K. (2000). Combustion of aluminized solid propellants. In *Solid Propellant Chemistry, Combustion, and Motor Interior Ballistics*, volume 185 of *Progress in Astronautics and Aeronautics*, pages 663–687. edited by V. Yang, T.B. Brill and W.-Z. Ren. *(p. 32)*

Radenac, E. (2009). Etude numérique et analytique de l'instabilité thermoacoustique dans les moteurs à propergol solide. Rapport technique ONERA RT 7/14116 DEFA. *(p. xviii, 45)*

Radenac, E. (2010a). Rapport technique T5.1.2. effets d'échelle en écoulement diphasique réactif. RT 4/16343 DEFA. *(p. 215)*

Radenac, E. (2010b). Rapport technique T5.1.3. effets d'échelle : simulations 2D du P230 à 87s. RT 3/17722 DEFA. *(p. 215)*

Radenac, E. (2013). Fluctuating energy balance method for postprocessing multiphase flow computations. *Journal of Propulsion and Power*, 29(3) :699–708. *(p. xviii, 1, 46)*

Raun, R. L. and Beckstead, M. W. (1993). A numerical model for temperature gradient and particle effects on Rijke burner oscillations. *Combustion and Flame*, 94(1-2) :1–24. *(p. 44)*

Refloch, A., Courbet, B., Murrone, A., Villedieu, P., Laurent, C., Gilbank, P., Troyes, J., Tessé, L., Chaineray, G., Dargaud, J. B., Quémerais, E., and Vuillot, F. (2011). CEDRE software. *Aerospace Lab*, 2 :1–10. Available at www.aerospacelab-journal.org/al2. *(p. 2)*

Reitz, R. D. (1987). Modeling atomization processes in high-pressure vaporizing sprays. *Atomisation Spray Technology*, 3 :309–337. *(p. 64)*

Reitz, R. D. and Bracco, F. V. (1982). Mechanism of atomization of a liquid jet. *Physics of Fluids*, 25(10) :1730–1742. *(p. 64)*

Reveillon, J., Bray, K. N. C., and Vervisch, L. (1998). DNS study of spray atomization and turbulent micro-mixing. AIAA PAPER 1998-1028*, 36th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*. 12-15 January 1998, Reno, Nevada. *(p. 74)*

Reveillon, J. and Vervisch, L. (2005). Analysis of weakly turbulent dilute-spray flames and spray combustion regimes. *Journal of Fluid Mechanics*, 537 :317–347. *(p. 74)*

Ribereau, D. and Le Breton, P. (1995). Simulation numérique des instabilités de fonctionnement observées sur un propulseur solide de type axisymétrique. In *Colloque CNES/ONERA/CNRS Ecoulements propulsifs dans les systèmes de transport spatial*, 11-15 septembre 1995, Bordeaux. *(p. 25)*

Richard, J. (2012). *Développement d'une chaîne de calcul pour les interactions fluide-structure et application aux instabilités aéro-acoustiques d'un moteur à propergol solide*. Thèse de l'Université de Montpellier II. *(p. xvii, 29, 30)*

Rider, W. J. and Kothe, D. B. (1998). Reconstructing volume tracking. *Journal of Computational Physics*, 141(2) :112–152. *(p. 64)*

Rijke, P. L. (1859). Notice of a new method of causing a vibration of the air contained in a tube open at both ends. *Philosophical Magazine Series 4*, 17(116) :419–422. *(p. 44)*

Riley, J. J. and Patterson, G. S. (1974). Diffusion experiments with numerically intergrated isotropic turbulence. *Physics of Fluids*, 17(2) :292–297. *(p. 73)*

Roe, P. L. (1981). Approximate Riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes. *Journal of Computational Physics*, 43(2) :357–372. *(p. 149)*

Rosenband, V. (2004). Thermo-mechanical aspects of the heterogeneous ignition of metals. *Combustion and Flame*, 137(3) :366–375. *(p. 32)*

Ruiz, H. and Kratz, J.-G. (1996). Programme ASSM 5 - Axe Phase Condensée - Granulométrie de la phase condensée. Rapport technique SNPE 4842/96/SNPE/DFP/CER. *(p. 36)*

Sabat, M. (2015). *Eulerian models and realizable numerical schemes for the description of low-to-medium inertia polydisperse sprays in turbulent two-phase flows*. Thèse de l'Université Paris-Saclay, CentraleSupélec. *(p. 154, 249)*

Sabat, M., Larat, A., Vié, A., and Massot, M. (2014). On the development of high order realizable schemes for the Eulerian simulation of disperse phase flows: a convex-state preserving Discontinuous Galerkin method. *The Journal of Computational Multiphase Flows*, 6(3) :247–270. *(p. 154)*

Sabnis, J. S., De Jong, F. J., and Gibeling, H. J. (1991). A two-phase distributed combustion model for metalized solid propellants. *Proceedings of the 28th JANNAF Combustion Subcommittee*, 2 :243–255. *(p. 51)*

Salita, M. (1994). Survey of recent $Al_2O_3$ droplet size data in Solid Rocket Chambers, Nozzles and Plumes. *Proceedings of the* $31^{st}$ *JANNAF Combustion Subcommittee Meeting*, 1 :1–18. *(p. 36)*

Saurel, R. and Abgrall, R. (1999). A multiphase Godunov method for compressible multifluid and multiphase flows. *Journal of Computational Physics*, 150(2) :425–467. *(p. 65)*

Scardovelli, R. and Zaleski, S. (1999). Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annual review of fluid mechanics*, 31(1) :567–603. *(p. 64)*

Schatzman, M. (2002). Towards non commutative numerical analysis : High order integration in time. *Journal of Scientific Computing*, 17(1–4) :99–116. *(p. 143)*

Schiller, L. and Naumann, A. (1935). A drag coefficient correlation. *V.D.I Zeitung*, 77 :318–320. *(p. 83)*

Shafer, J. I. (1959). *Solid Rocket Propulsion.* in Space Technology, edited by H. S. Seifert, John Wiley & Sons, New-York. *(p. xvii, 19)*

Shampine, L. F., Sommeijer, B. P., and Verwer, J. G. (2006). IRKC : An IMEX solver for stiff diffusion-reaction PDEs. *Journal of Computional and Applied Mathematics*, 196(2) :485–497. *(p. 5, 141)*

Shardt, O. and Derksen, J. J. (2012). Direct simulations of dense suspensions of non-spherical particles. *International Journal of Multiphase flow*, 47 :25–36. *(p. 73)*

Shu, C. W. (1997). Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws, Advanced numerical approximation of nonlinear hyperbolic equations. *Lecture Notes in Mathematics*, 1697 :325–432. *(p. 151, 177)*

Shu, C. W. and Osher, S. (1988). Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes. *Journal of Computational Physics*, 77(2) :439–471. *(p. 159)*

Sibra, A., Dupays, J., Murrone, A., Laurent, F., and Massot, M. (2013). Efficient numerical coupling strategy for evaporating polydisperse sprays in unsteady multi-species flows : Application to solid rocket motor simulations. 5th European Conference for Aeronautics and Space Sciences, EUCASS. 1-5 July 2013, Munich, Germany. *(p. xviii, 55)*

Sibra, A., Dupays, J., Murrone, A., Laurent, F., and Massot, M. (2014). Simulation of reactive sprays coupled to unsteady flows in solid rocket motors: Efficient strategy using Eulerian multi-fluid methods. *Submitted to Journal of Computational Physics.* Available on https ://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01063816. *(p. xviii, 41, 42, 142)*

Simoes, M. (2006). *Modélisation eulérienne de la phase dispersée dans les moteurs à propergol solide, avec prise en compte de la pression particulaire.* Thèse de l'Institut National Polytechnique de Toulouse. *(p. 2, 71, 97, 153)*

Simoes, M., Della Pieta, P., Godfroy, F., and Simonin, O. (2005). Continuum modeling of the dispersed phase in solid rocket motors. AIAA PAPER 2005-4698*, 17th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference.* 6-9 June 2005, Toronto, Canada. *(p. 2, 97)*

Sirignano, W. A. (2010). *Fluid Dynamics and Transport of Droplets and Sprays.* Second edition, Cambridge University Press, Cambridge. *(p. 73, 83, 84, 90)*

Squires, K. D. and Eaton, J. K. (1991). Measurements of particle dispersion obtained from direct numerical simulations of isotropic turbulence. *Journal of Fluids Mechanics*, 226 :1–35. *(p. 74)*

Strang, G. (1968). On the construction and comparison of difference schemes. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 5(3) :506–517. *(p. 142)*

Struchtrup, H. (2005). *Macroscopic Transport Equations for Rarefied Gas Flows.* Springer. *(p. 66)*

Summerfield, M. and Krier, H. (1969). Role of aluminum in suppressing instability in solid propellant rocket motors. *Problems of Hydrodynamics and Continuum Mechanics, Sixtieth Anniversary Volume, Society for Independent and Applied Mathematics*, pages 703–717. Philadelphia, PA. *(p. 39)*

Sussman, M. and Puckett, E. G. (2000). A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3d and axisymmetric incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 162(2) :301–337. *(p. 64)*

Sussman, M., Smereka, P., and Osher, S. (1994). A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *Journal of Computational Physics*, 114(1) :146–159. *(p. 64)*

Sutton, G. P. and Biblarz, O. (2001). *Rocket propulsion elements : an introduction to the engineering of rockets*. 7th edition, Wiley-Interscience, Chichester, UK. *(p. 16)*

Swihart, M. T. and Catoire, L. (2000). Thermochemistry of aluminum species for combustion modeling from ab initio molecular orbital calculations. *Combustion and Flame*, 121(1-2) :210–222. *(p. 34, 53)*

Tambour, Y. (1984). Vaporization of polydisperse fuel sprays in a laminar boundary layer flow: A sectional approach. *Combustion and Flame*, 58(2) :103–114. *(p. 4)*

Taylor, G. (1956). Fluid flow in regions bounded by porous surfaces. *Proceedings of the Royal Society of London, Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 234(1199) :456–475. *(p. 26)*

Temkin, S. (2005). *Suspension acoustics - an introduction to the physics of suspensions*. Cambridge University Press. *(p. 54)*

Temkin, S. and Dobbins, R. (1966). Attenuation and dispersion of sound by particulate-relaxation processes. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 40(2) :317–324. *(p. 40)*

Terashima, H. and Tryggvason, G. (2009). A front-tracking/ghost-fluid method for fluid interfaces in compressible flows. *Journal of Computational Physics*, 228(11) :4012–4037. *(p. 64)*

Tessé, L. and Lamet, J.-M. (2011). Radiative Transfer Modeling Developed at Onera for Numerical Simulations of Reactive Flows. *AerospaceLab Journal*, 2 :1–19. *(p. 196)*

Thalhammer, M. (2008). High-order exponential operator splitting methods for time-dependent Schrödinger equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 46(4) :2022–2038. *(p. 143)*

Thomine, O. (2011). *Développement de méthodes multi-échelles pour la simulation numérique des écoulements réactifs diphasiques*. Thèse de l'Université de Rouen. *(p. xviii, 74)*

Toro, E. F. (2009). *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics*. 3th edition, Springer. *(p. 148, 149)*

Tory, E. M., Bürger, R., Concha, F., and Bustos, M. C. (1999). *Sedimentation and Thickening - Phenomenological Foundation and Mathematical Theory*. Springer. *(p. 73)*

Traineau, J.-C., Prévost, M., Vuillot, F., Le Breton, P., Cuny, J., Preioni, N., and Bec, R. (1997). A subscale test program to assess the vortex shedding driven instabilities in segmented solid rocket motors. AIAA PAPER 1997-3247*, 33rd AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*. 6-9 July 1997, Seattle, WA. *(p. 26)*

Trotter, H. F. (1959). On the product of semi-groups of operators. *Proceedings of the American Mathematical Society*, 10 :545–551. *(p. 142)*

Trubert, J.-F. (2000). Combustion de particules isolées d'aluminium en ambiance de gaz de combustion de propergol. Rapport technique ONERA RT 6/00584. *(p. 34)*

Tryggvason, G., Bunner, B., Esmaeeli, A., Juric, D., Al-Rawahi, N., Tauber, W., Han, J., Nas, S., and Jan, Y.-J. (2001). A front-tracking method for the computations of multiphase flow. *Journal of Computational Physics*, 169(2) :708–759. *(p. 64)*

Turner, M. J. L. (2009). *Rocket and spacecraft propulsion : principles, practice and new developments*. 3th edition, Springer Praxis edition, Royaume-Uni. *(p. 18)*

Turns, S. R., Wong, S. C., and Ryba, E. (1987). Combustion of aluminium-based slurry agglomerates. *Combustion Science and Technology*, 54(1-6) :299–318. *(p. 50)*

Ugurtas, B., Avalon, G., Lupoglazoff, N., Vuillot, F., and Casalis, G. (2000). Stability and acoustic resonance of internal flows generated by side injection. In *Solid Propellant Chemistry, Combustion, and Motor Interior Ballistics*, volume 185 of *Progress in Astronautics and Aeronautics*, pages 823–836. edited by V. Yang, T.B. Brill and W.-Z. Ren. *(p. 27)*

Van Leer, B. (1979). Toward the ultimate conservation difference scheme v. a second-order sequel to godunov's method. *Journal of Computational Physics*, 32(1) :101–135. *(p. 150)*

Varapaev, V. N. and Yagodkin, V. I. (1969). Flow stability in a channel with porous walls. *Izv. AN SSSR. Mekhanika Zhidkosti i Gaza*, 4(5) :91–95. *(p. 26)*

Vié, A., Doisneau, F., and Massot, M. (2015). On the Anisotropic Gaussian velocity closure for inertial-particle laden flows. *Communication in Computational Physics*, 17(1) :1–46. Available on http ://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00912319. *(p. 4, 91, 97, 153)*

Vié, A., Laurent, F., and Massot, M. (2013). Size-velocity correlations in hybrid high order moment/multi-fluid methods for polydisperse evaporating sprays: modeling and numerical issues. *Journal of Computational Physics*, 237 :177–210. *(p. 5, 98, 101, 103, 153)*

Villedieu, P., Blanchard, G., and Zuzio, D. (2013). Numerical simulation of primary atomization of a sheared liquid sheet. part 2 : Comparison with experimental results. *Conference ILASS, Europe 2013, 25th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems*. 1-4 September 2013, Chania, Greece. *(p. 65)*

Villedieu, P., Hylkema, J. J., Lavergne, G., Platet, B., Fabignon, Y., Vardelle, M., Guéry, J.-F., Godfroy, F., Le Helley, P., and Jacques, L. (2000). Slag accumulation in solid propellant rocket motors with a submerged nozzle. *2nd European Conference on Launcher Technology, Space Solid Propulsion*. 21-24 November 2000, Rome, Italy. *(p. 23)*

Vuillot, F. (1995). Vortex-shedding phenomena in solid rocket motors. *Journal of Propulsion and Power*, 11(4) :626–639. *(p. 25)*

Vuillot, F. and Casalis, G. (2000). Recent advances on the stability of large segmented space boosters. *2nd European Conference on Launcher Technology, Space Solid Propulsion*. 21-24 November 2000, Rome, Italy. *(p. 27)*

Vuillot, F. and Lupoglazoff, N. (1996). Combustion and turbulent flow effects in 2D unsteady Navier-Stokes simulations of oscillatory solid rocket motors - First applications. AIAA paper 1996-884*, 34th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*. 15-18 January 1996, Reno, NV. *(p. 24, 25, 26)*

Vuillot, F. and Refloch, A. (2014). Some HPC challenges for multi-physics extended CFD computations. *16th IEEE International Conference on High Performance Computing and Communication (HPCC2014)*. 20-22 August 2014, Paris, France. *(p. xxi, 197)*

Williams, F. A. (1958). Spray combustion and atomization. *Physics of Fluids*, 1(6) :541–545. *(p. 3, 76, 77, 89)*

Williams, F. A. (1985). *Combustion Theory (Combustion Science and Engineering Series)*. Ed. F. A. Williams (Reading, MA : Addison-Wesley). *(p. 3, 76, 77, 84, 89)*

Wilson, R. P. and Williams, F. A. (1971). Experimental study of the combustion of single aluminum particles in O2/Ar. *Symposium International on Combustion*, 13(1) :833–845. *(p. 33, 34, 51)*

Wunsch, D. (2009). *Theoretical and numerical study of collision and coalescence - Statistical modeling approaches in gaz-droplet turbulent flows*. Thèse de l'Institut National Polytechnique de Toulouse. *(p. 74)*

Xu, Y. and Subramaniam, S. (2010). Effects of particle clusters on carrier flow turbulence: a direct numerical simulation study. *Flow, Turbulence and Combustion*, 85(3-4) :735–761. *(p. 73)*

Yetter, R. A., Risha, G. A., and Son, S. F. (2009). Metal particle combustion and nanotechnology. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32(2) :1819–1838. *(p. 31)*

Zamansky, R., Coletti, F., Massot, M., and Mani, A. (2014). Radiation induced turbulence in particle-laden fluids. *Physics of Fluids*, 26(7) :1–7. *(p. 3, 75, 91)*

Zhang, X., Xia, Y., and Shu, C.-W. (2012). Maximum-principle-satisfying and positivity-preserving high order Discontinuous Galerkin schemes for conservation laws on triangular meshes. *Journal of Scientific Computing*, 50(1) :29–62. *(p. 152)*

Zhu, H. P., Zhou, Z. Y., Yang, R. Y., and Yu, A. B. (2007). Discrete particle simulation of particulate systems : theoretical developments. *Chemical Engineering Science*, 62(13) :3378–3396. *(p. 73)*