



HAL
open science

Simulation aux grandes échelles des écoulements liquide-gaz : application à l'atomisation

Nicolas Hecht

► **To cite this version:**

Nicolas Hecht. Simulation aux grandes échelles des écoulements liquide-gaz : application à l'atomisation. Physique [physics]. INSA de Rouen, 2016. Français. NNT : 2016ISAM0026 . tel-01654625

HAL Id: tel-01654625

<https://theses.hal.science/tel-01654625v1>

Submitted on 4 Dec 2017

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.



Normandie Université

THESE

Pour obtenir le diplôme de doctorat

Énergétique

Préparée au sein de « CORIA »

**Simulation aux grandes échelles des écoulements liquide-gaz :
application à l'atomisation**

Présentée et soutenue par
Nicolas HECHT

Thèse soutenue publiquement le 15/03/2016
devant le jury composé de

Mr Francis DUPOIRIEUX	Directeur de recherche, ONERA	Rapporteur
Mr Mikhael GOROKHOVSKI	Professeur, École centrale de Lyon	Rapporteur
Mr François-Xavier DEMOULIN	Maître de conférence, Université de Rouen	Directeur de thèse
Mr Julien REVELLION	Professeur, Université de Rouen	Codirecteur de thèse
Mr Stéphane VINCENT	Professeur, Université Paris Est	Examineur
Mr Roland BORGHI	Professeur, Université d'Aix-Marseille II	Examineur

Thèse dirigée par François Xavier DEMOULIN laboratoire CORIA et Julien REVELLON laboratoire CORIA



Table des matières

Introduction	13
1 État de l'art de l'atomisation	21
1.1 Processus d'atomisation	21
1.1.1 Nombres adimensionnels	22
1.1.2 Paramètre influençant l'atomisation primaire	24
1.1.3 Paramètres morphologiques du spray	26
1.2 Approche Numérique	27
1.2.1 Modélisation des équations de Navier-Stokes	27
1.2.1.a Simulation numérique directe	28
1.2.1.b Simulation aux grandes échelles	30
1.2.1.c Le formalisme RANS	31
1.2.2 Prise en compte d'une Interface	32
1.2.2.a Méthodes VOF	33
1.2.2.b Méthodes LevelSet	35
1.2.2.c Méthodes de compression d'interface	38
1.2.3 Modélisation de l'atomisation primaire	39
1.2.4 Modélisation de l'atomisation secondaire	41
1.2.5 Modélisation du spray dispersé	42
1.3 Bilan et conclusions	43
2 Couplage des méthodes de suivi d'interface aux méthodes Lagrangiennes	45
2.1 Introduction	45
2.2 Méthode Numérique	46
2.2.1 Approche Eulérienne	46
2.2.1.a Équations de Navier-Stokes	46
2.2.1.b Méthode de suivi d'interface	48
2.2.1.c Traitement des discontinuités :	49

2.2.2	Approche Lagrangienne	51
2.2.2.a	Équation Lagrangienne	52
2.2.2.b	Loi de traînée	52
2.2.3	Forçage turbulent	53
2.2.4	Configuration numérique	54
2.3	Transformation des structures liquides en particules lagrangiennes	55
2.3.1	Introduction	56
2.3.2	Labélisation des structures liquides	59
2.3.3	Critère de transition	60
2.3.4	Transition entre le calcul eulérien et le calcul lagrangien	62
2.3.4.a	Diamètre des particules	63
2.3.4.b	Position des particules	63
2.3.4.c	Vitesse des particules	63
2.3.5	Destruction des structures liquides transformées	64
2.3.6	Analyse des critères de transformations	64
2.4	Analyse de l'influence de la transformation sur différentes grandeurs physiques	68
2.4.1	Évolution de la masse	68
2.4.2	Évolution de la quantité de mouvement	69
2.4.3	Évolution de l'énergie cinétique turbulente	70
2.5	Conclusion et perspectives	72
3	Développement d'un modèle LES pour l'atomisation	75
3.1	Simulation diphasique aux grandes échelles	76
3.1.1	Généralités sur la simulation aux grandes échelles	76
3.1.2	Intérêts de la LES	78
3.1.3	Équations de Navier-Stokes monophasiques	79
3.1.4	Équations de Navier-Stokes filtrées	80
3.1.5	Modélisation de sous maille	80
3.1.5.a	Modèle de viscosité	81
3.1.5.b	Modèle de Smagorinsky	82
3.1.5.c	Modèle de similarité d'échelles	82
3.1.6	Approche MonoFluide	83
3.1.7	Filtrage des équations monofluides	85
3.1.8	Modélisation de sous maille	87
3.2	Problématique de l'approche LES de l'atomisation	88
3.3	Solveur InterFoam	92

3.3.1	Méthode de suivi d'interface	92
3.3.2	Résolution du couplage Vitesse/Pression	95
3.3.3	Prise en compte de la LES	99
3.4	Changement de formalisme DNS/LES	100
3.4.1	Idée générale du modèle	100
3.4.2	Équation à résoudre	101
3.4.2.a	Gestion de l'équation de transport de l'interface	102
3.4.2.b	Terme de sous maille de transport	103
3.4.2.c	Équation de continuité	103
3.4.2.d	L'équation de la conservation de la quantité de mouve- ment	103
3.4.3	ELSA : densité interfaciale	104
3.4.4	Critère de transition	107
3.4.4.a	Critère IRQ_{Σ}	107
3.4.4.b	Critère IRQ_K	108
3.5	Couplage Eulérien/Lagrangien	111
3.5.1	Présentation du couplage	111
3.5.2	Critère de transformation	113
3.5.3	Initialisation des particules lagrangiennes	113
3.5.4	Transport des particules lagrangiennes	114
3.5.5	Couplage Euler -> Lagrange	114
3.5.6	Couplage Lagrange -> Euler	115
3.6	Conclusion	117
4	Résultats du modèle LES d'atomisation	119
4.1	Configuration numérique	119
4.2	InterFoam Standard	121
4.2.1	Fraction volumique de liquide	123
4.2.2	Impact de la résolution du maillage	124
4.2.3	Méthode Compressive (InterFOAM) vs Méthode CLSVOF (AR- CHER)	125
4.3	Modèle de sous maille pour les structures liquides	125
4.3.1	Test numérique	126
4.3.2	Détermination des critères de transitions	127
4.3.3	Comportement du modèle	128
4.3.4	Vitesse interfaciale dans un spray Diesel	130
4.3.4.a	Configurations expérimentales et numériques	131

4.3.4.b	Comparaison entre la vitesse expérimentale et numérique	132
4.4	Couplage Euler-Lagrange	133
4.5	Conclusion	134
5	Conclusion Générale	151

Table des figures

1	Récapitulatif des différents phénomènes physiques présents au sein d'une chambre de combustion. En rouge se trouvent les processus étudiés au cours de ce travail. (Thèse Benjamin Duret)	14
2	Description du processus d'atomisation. (Thèse Benjamin Duret)	15
1.1	Schématisation des différents processus pouvant mener à l'atomisation primaire d'après Baumgarten. (a) Les forces aérodynamiques, (b) Le phénomène de turbulence, (c) Relaxation du profil de vitesse et (d) cavitation.	25
1.2	Paramètres morphologiques d'un spray	27
1.3	Récapitulatif des différents formalismes utilisés pour la simulation et la modélisation de l'atomisation primaire. Représentation des échelles résolues par chaque formalisme (comparé à un jet expérimental à gauche). Utilisation du modèle ELSA pour les formalismes LES et RANS. De haut en bas : DNS de Menard et al. [1], LES de Chesnel et al. [2], simulation RANS de Lebas et al. [3] (Thèse Benjamin Duret)	29
1.4	Principe de la méthode VOF. A gauche : interface réelle et fonction α associée ; Au milieu : reconstruction SLIC ; A droite : reconstruction PLIC	34
1.5	Différents types de représentations : VOF à gauche et levelSet à droite	36
1.6	Définition de la LevelSet permettant de localiser une interface Γ	37
1.7	Désintégration d'un jet rond selon le modèle WAVE.	40
1.8	Schéma descriptif du bag breakup	42
1.9	Schéma descriptif du stripping breakup	42
2.1	Illustration de la méthode Ghost Fluid pour une variable A . \bullet : points dans le gaz, \blacksquare : points dans le liquide. \circ , \square : points ghost gaz et liquide respectivement. Γ représente l'interface liquide-gaz. (Thèse Benjamin Duret)	50

2.2	Schéma représentant la configuration numérique étudiée (THID). (Thèse Benjamin Duret)	55
2.3	Visualisation de l'interface liquide gaz dans une thi à 5%	57
2.4	Visualisation de l'interface liquide gaz dans une thi à 5% avec des particules lagrangiennes (rouges)	58
2.5	Algorithme de labélisation des structures liquides	60
2.6	Exemple d'action de l'algorithme de labélisation (du haut gauche vers bas à droite)	61
2.7	Algorithme de labélisation des structures liquides	61
2.8	Exemple du maximum de la fonction distance d'une structure liquide (bleu) et du rayon équivalent de la représentation lagrangienne (pointillés)	62
2.9	Mesure de l'excentricité en fonction du diamètre des particules	65
2.10	Problème de mesure sur de l'excentricité dans la cas d'une goutte sphérique	66
2.11	Mesure de l'excentricité en fonction de la surface des particules	67
2.12	Mesure de la surface en fonction du diamètre des particules	68
2.13	Ratio de la masse Lag/Eul en fonction du diamètre des particules	70
2.14	Ratio de la quantité de mouvement Lag/Eul en fonction du diamètre des particules	71
2.15	Ratio de l'énergie cinétique turbulente Lag/Eul en fonction du diamètre des particules	72
3.1	Spectre de l'énergie cinétique turbulente	77
3.2	Spectres de l'énergie résolue et modélisée, séparés par la fréquence de coupure K_c	78
3.3	Décomposition spectrale basée sur l'hypothèse de similarité d'échelles	83
3.4	Cas (a) DNS, $128^2 \times 1024$	90
3.5	Cas (b) DNS, $64^2 \times 512$	90
3.6	Cas (c) DNS, $32^2 \times 256$	90
3.7	Comparaison d'un Jet DNS	90
3.8	Fraction de volume de liquide dans la direction d'injection pour les 3 cas : DNS128, DNS64 et DNS32	91
3.9	Schématisation des différentes résolutions de l'interface en fonction de la taille de la maille de calcul	92
3.10	Principe du changement de formalisme DNS/LES	101
3.11	Schéma explicatif de la densité interfaciale.	105

3.12 Niveau du critère IRQ_{Σ} sur la surface définie comme l'isocontour 0.5 de la fraction volumique de liquide.	109
3.13 Schéma explicatif du critère IRQ_k	110
3.14 Niveau du critère IRQ_k sur la surface définie comme l'isocontour 0.5 de la fraction volumique de liquide.	112
3.15 Principe de modification des distributions de taille de particules lagrangiennes en prenant comme référence le diamètre moyen de Sauter eulérien pour reconstruire une nouvelle distribution de taille hybride Euler - Lagrange	116
4.1 Configuration géométrique du cas test de référence	120
4.2 Maillage de vue face : La zone d'injection du liquide est représentée en rouge	122
4.3 Maillage de vue Profil	123
4.4 Évolution temporelle de la fraction volumique de liquide α via le solveur interFoam	136
4.5 Comparaison de jet obtenu sur différents maillages via le solveur InterFOAM : équivalent $64^2 \times 256$ à gauche et un équivalent à $128^2 \times 512$ à droite	137
4.6 Comparaison de jet obtenu via différentes méthodes sur un maillage équivalent : InterFOAM (gauche) et ARCHER (droite)	138
4.7 Évolution temporelle d'un jet en utilisant dans premier temps une méthode de suivi d'interface compressive puis dans un second temps , des termes de sous maille.	139
4.8 Évolution temporelle d'un jet en utilisant dans la partie haute une méthode de suivi d'interface compressive et dans la partie basse des termes de sous maille.	140
4.9 Évolution des zones non résolues sur l'isosurface 0.5 de la fraction volumique de liquide pour différents critères de transition IRQ_{Σ} : 0.5, 0.7, 0.9 (de haut en bas)	141
4.10 Évolution des zones non résolues en blanc pour différents critères de transition IRQ_{Σ} : 0.65, 0.75, 0.9 (de haut en bas)	142
4.11 Évolution des zones non résolues en blanc pour différents critères de transition IRQ_k : 0.5, 1, 1.5 (de haut en bas)	143
4.12 Évolution temporelle de la fraction volumique de liquide α	144
4.13 Évolution temporelle de la densité d'interface Σ	145
4.14 Évolution temporelle de l'échelle du diamètre de Sauter D_{32}	146

4.15 Représentation schématique de l'injecteur utilisé par Kamel Lounnaci (schéma issu de thèse de Lounnaci)	147
4.16 Profil de vitesse à la sortie de l'injecteur (Thèse Kamel Lounnaci)	147
4.17 Visualisation de la localisation des profils radiaux en : $500\mu m$, $700\mu m$, $1500\mu m$, $2000\mu m$	148
4.18 Évolution de la vitesse interfaciale en fonction de la distance à l'axe d'injection pour différentes positions suivant l'axe : $500\mu m$, $750\mu m$, $1500\mu m$, $2000\mu m$	148
4.19 Évolution de l'isosurface 0.5 de la fraction volumique de liquide avec les particules lagrangiennes au temps $t = 2 \cdot 10^{-6}s$ à $t = 1 \cdot 10^{-5}s$	149
5.1 Jet coaxial réalisé avec une méthode de raffinement automatique de maillage via le code ARCHER	156

Introduction Générale

Les normes concernant les émissions de polluants sont de plus en plus strictes. Il est donc nécessaire de développer de nouveaux types de moteurs à combustion plus performants et moins polluants. La mise au point de tels moteurs demande une analyse fine des phénomènes mis en jeu dans la chambre de combustion (Figure 1). Ceux-ci peuvent être résumés et simplifiés de la manière suivante : Le carburant injecté sous forme liquide est atomisé, fractionné pour former un spray dispersé. Celui-ci va ensuite s'évaporer et se mélanger au sein de la chambre de combustion. Lorsque le mélange est homogène la combustion peut prendre place.

Dans ce contexte, le premier phénomène à étudier est l'atomisation. En effet celle-ci conditionne tous les autres phénomènes présents dans la chambre de combustion. Une mauvaise atomisation peut engendrer un mélange inhomogène et cela impacte directement la combustion et donc la génération de polluants. Le processus d'atomisation peut être décomposé en trois phases, illustrées sur la figure 2 : l'atomisation primaire, l'atomisation secondaire et enfin la zone diluée.

La région de l'atomisation primaire correspond à la zone où des paquets liquides se détachent du cœur liquide. Ces détachements sont dus aux instabilités de turbulence (Rayleigh-Taylor, Kelvin Helmholtz) apparaissant à l'interface liquide-gaz.

L'atomisation secondaire correspond au processus de break-up et coalescence des structures liquides. En effet certains paquets liquides générés par l'atomisation primaire vont continuer de se fragmenter pour former de fines gouttelettes. Alors que d'autres paquets liquides peuvent collapser pour former une seule entité.

Dans la zone diluée, les structures liquides n'interagissent plus, ou très peu, entre elles. La tension de surface domine les forces exercées sur les gouttelettes, de ce fait la surface des gouttes sera minimale ce qui aura pour effet de les rendre sphériques. C'est dans cette région qu'a lieu la majorité de l'évaporation et la vapeur issue du liquide participe alors au mélange gazeux.

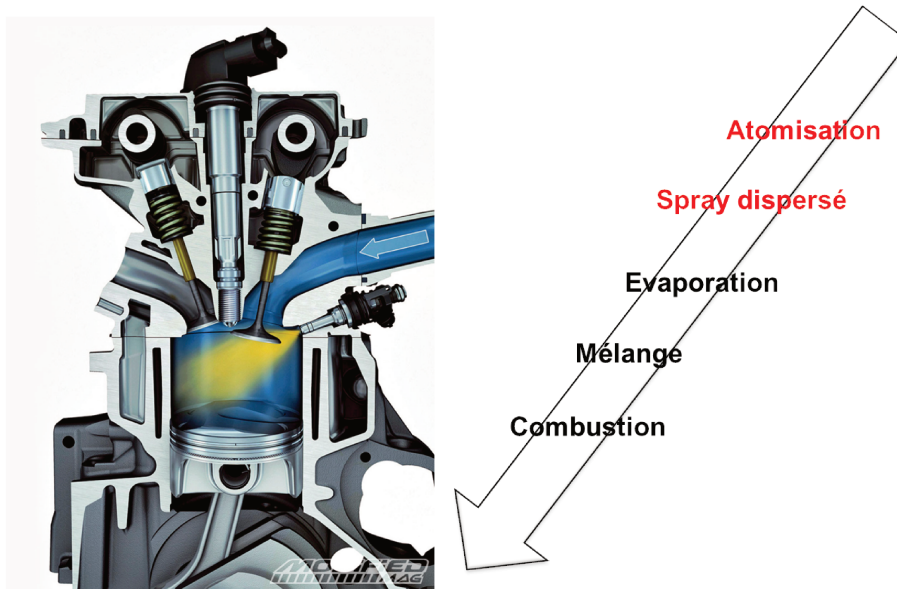


FIGURE 1 – Récapitulatif des différents phénomènes physiques présents au sein d’une chambre de combustion. En rouge se trouvent les processus étudiés au cours de ce travail. (Thèse Benjamin Duret)

Expérimentalement l’analyse des deux premières régions est rendue ardue par variation de densité près du jet liquide et la présence d’interfaces. En effet, dans ces zones, les fractions volumiques de liquide et les densités d’interfaces sont particulièrement élevées ce qui complique les procédés expérimentaux qui sont principalement basés sur des systèmes optiques. De plus l’analyse expérimentale du spray doit se faire dans les conditions de fonctionnement du moteur. Les méthodes expérimentales nécessitent encore de nombreux développements afin d’être capable de capturer le cœur liquide et ses instabilités.

De façon plus générale, l’étude de l’écoulement d’un spray ou du processus d’atomisation est complexe du fait de sa nature multi-échelle. En effet la problématique d’échelle spatiale nécessaire pour capturer à la fois les phénomènes turbulents et diphasiques n’a pas de réponse immédiate. Pour un écoulement turbulent monophasique il faut être en mesure d’étudier la gamme d’échelles allant des échelles intégrales contenant l’énergie de la turbulence, jusqu’aux échelles de Kolmogorov où cette éner-

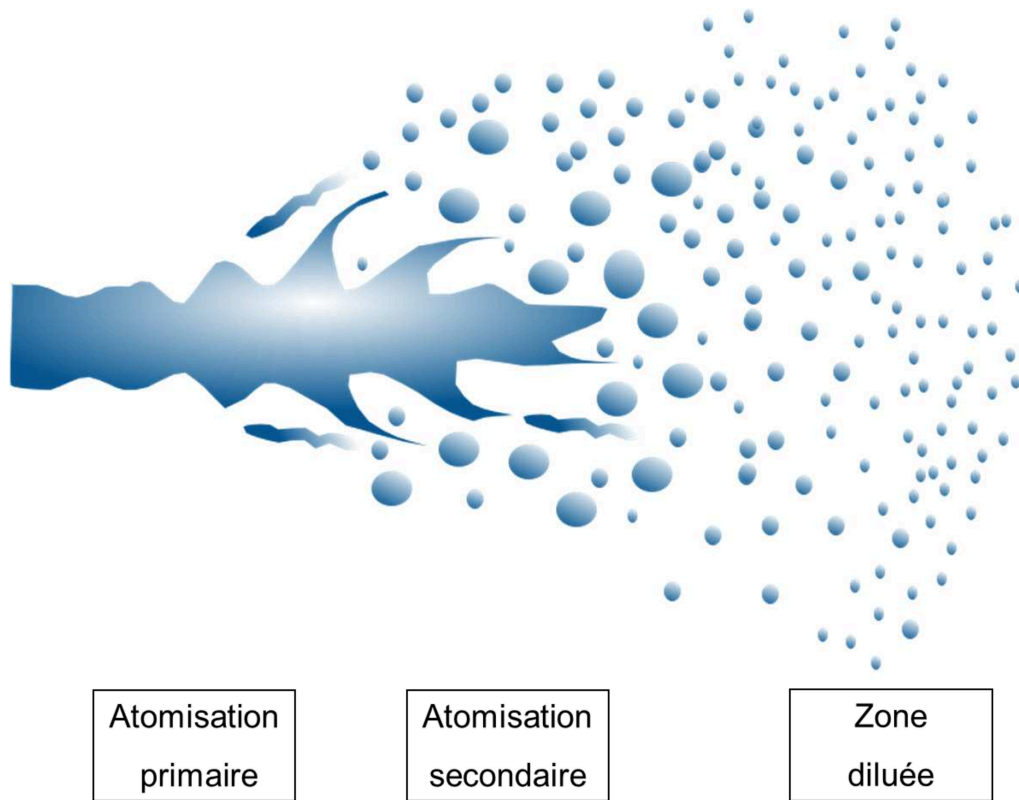


FIGURE 2 – Description du processus d’atomisation. (Thèse Benjamin Duret)

gie se dissipe. Pour un écoulement diphasique, la résolution doit de plus permettre de capturer les déformations de l’interface ainsi que les plus petites structures liquides. De plus il ne faut pas négliger le fait que les différentes vitesses de l’écoulement ainsi que le phénomène d’évaporation impliquent une très large gamme d’échelles temporelles.

Récemment, les simulations numériques sont devenues un outil mature en complément des expériences pour l’investigation des écoulements multiphasiques. Des simulations numériques complexes de spray ont été réalisées [4][5][6], et prouvent leur capacité à obtenir des résultats fiables. Elles permettent d’avoir accès à des champs tridimensionnels et instationnaires. Ces simulations sont gouvernées par les équations de Navier-Stokes. Il existe principalement trois grandes familles de formalismes permettant de résoudre le problème : la simulation numérique directe (ou DNS direct

numerical simulation), le formalisme RANS (Reynolds Average Navier-Stokes) et le formalisme LES (Large Eddy Simulation ou simulation aux grandes échelles)

Le formalisme DNS résout avec précision toutes les échelles de l'écoulement, de ce fait la discrétisation spatiale et temporelle doit être très fine. Le coût numérique d'une telle simulation est donc très important. Il n'est d'ailleurs pas encore possible de réaliser une simulation complète de l'injection d'un spray (depuis l'atomisation jusqu'à la phase dispersé) via le formalisme DNS malgré des milliards de points de calcul. La simulation numérique directe est donc limitée à des domaines relativement restreints, quelques dizaines de diamètre de l'injecteur. La DNS est cependant un outils précieux afin de valider ou de comprendre un phénomène physique mais son application à des configurations industrielles reste difficilement envisageable.

Le formalisme RANS consiste à travailler sur des grandeurs moyennées. Les écoulements considèrent les fluctuations à hautes fréquences temporelles et spatiales. Le problème à résoudre est donc simplifié ce qui permet de réduire considérablement le coût numérique d'une telle simulation. Ainsi cette approche est privilégiée par la communauté industrielle. Cependant les équations nécessitent le choix de modèle de fermeture qui sont très dépendants de la configuration de l'écoulement. Il existe peu de modèles physiques dans la littérature pour la zone dense de l'atomisation, même si l'application de l'approches RANS a permis la simulation complète de l'injection Diesel ou d'injecteur

Le formalisme LES prend le parti de résoudre les équations de Navier-Stokes filtrées : seule la partie basse fréquence de l'écoulement sera résolue. Elle correspond aux grandes échelles de celui-ci. Une modélisation devra être effectuée pour la partie haute fréquence (les petites échelles de l'écoulement). Une échelle de coupure séparant les grandes échelles des petites échelles doit être définie de telle manière que les structures modélisées soient relativement découplées des structures moyennes. La résolution spatiale nécessaire pour appliquer ce type de formalisme est beaucoup moins élevée que pour le formalisme DNS puisqu'une partie des phénomènes est modélisée. La LES est donc un compromis entre la DNS et le RANS étant donné que les résultats seront souvent plus précis que ceux obtenus via le formalisme RANS tout en ayant un coût numérique moins important que la DNS. Un avantage certain de l'approche LES est de permettre de bénéficier de l'augmentation des puissances de calcul.

Cependant la simulation numérique de l'atomisation reste un défi quel que soit le formalisme choisi. Deux méthodes sont actuellement utilisées :

- Un modèle empirique et théorique représentant la zone dense et donnant le spray formé qui en est issu, comme le fait Reitz [7]

- Un modèle où la zone dense et la zone dispersée sont simulées séparément et les "sorties" de la simulation de la zone dense (obtenues via une approche DNS) sont utilisées comme conditions d'entrée pour la simulation de la zone dispersée. En effet une analyse phénoménologique de la zone dense permet d'initialiser la zone dispersée avec la bonne densité de structure liquide. La zone dispersée contenant un spray composé de multiples gouttelettes sphériques ayant peu d'interactions entre elles, il est alors possible de représenter l'écoulement dans et autour des gouttelettes de façon simplifiée en l'assimilant à un écoulement de particules solides dans une phase porteuse que l'on peut suivre dans l'espace et le temps [8]. Il s'agit de la formulation Lagrangienne.

Dans la zone dense, les interactions entre les structures liquides sont beaucoup plus importantes. De ce fait, un autre formalisme doit être utilisé. Les formalismes DNS et LES utilisent une méthode eulérienne de suivi d'interface et différentes approches sont possibles pour traiter le problème, par exemple :

- Les méthodes de type Volume Of Fluid (VoF) permettent de suivre l'évolution des fractions volumiques de liquide dans chaque cellule du calcul. Ces méthodes ont été développées dans les années 80 [9] et permettent une très bonne conservation de la masse.
- Les méthodes de type Level-Set définissent une fonction distance dans le domaine de calcul dont la courbe de niveau zéro est l'interface que l'on cherche à décrire. Le calcul des caractéristiques géométriques de l'interface est particulièrement précis.

Des simulations DNS de l'atomisation primaire ont déjà été réalisées [5, 4, 6, 10], cependant la prise en compte des plus petites structures liquides restent un challenge quelles que soit les méthodes utilisées. De plus la simulation LES de l'atomisation primaire reste un défi [11]. En effet la gestion de l'interface liquide/gaz dans les zones sous-résolues est encore un problème ouvert, tout comme le passage d'une interface résolue à une interface de sous-maille.

C'est dans ce contexte que s'inscrit cette thèse. L'objectif de cette étude est de développer un modèle permettant simuler tout le processus d'atomisation, de l'atomisation primaire jusqu'au spray dispersé. Une première approche consiste à coupler le formalisme DNS avec une approche lagrangienne. Le principe est de transformer les petites structures liquides résolues avec des méthodes de suivi d'interface en particules lagrangiennes. Cette modélisation est réalisée dans le code de calcul ARCHER [4, 1], et va permettre, à terme, d'élargir le domaine de calcul en augmentant la taille de la maille par rapport à un formalisme DNS standard. Une seconde approche étudiée dans

ce travail se concentre sur le développement d'un modèle LES de l'atomisation et plus particulièrement sur le traitement de l'interface dans les cas non résolus et le passage à l'interface de sous maille. Ce développement est réalisé avec le code OpenFOAM, permettant ainsi de réaliser des simulations de sprays en prenant en compte des géométries complexes et donc la forme d'injecteurs réels.

Plan du mémoire

Dans le premier chapitre, un rappel sur les différentes méthodes numériques utilisées pour la simulation numérique des fluides incompressibles diphasiques sera proposé. Un effort particulier sera effectué dans la description des méthodes de suivi d'interface. Enfin les méthodes numériques utilisés du code ARCHER et du solveur OpenFOAM seront décrites.

Ensuite le chapitre 2, présentera le développement d'un couplage Euler/Lagrange. Dans un premier temps nous montrerons la nécessité d'un tel couplage. Puis le principe général du couplage est alors présenté, ainsi que sa mise en œuvre dans le code ARCHER. Enfin une analyse sur les critères de transformation et sur l'influence du couplage sur différentes grandeurs physiques sera effectuée.

Le chapitre 3 présentera le développement d'un modèle LES spécifiquement dédié à l'atomisation. Une attention particulière sera portée au traitement de l'interface liquide-gaz au niveau du passage d'interface résolue vers le spray de sous maille. Le principe général du modèle est présenté, tout comme une équation de transport pour la densité interface de sous maille, celle-ci permettant la définition des critères de transition entre les zones bien résolues utilisant un formalisme DNS avec une méthode de suivi d'interface et les zones utilisant une formalisme LES avec des termes de sous mailles. Un autre type de modèle Euler/Lagrange dédié au diphasique est aussi présenté. Contrairement au couplage du chapitre 2, les particules lagrangiennes ne remplacent plus les structures liquides mais servent à transporter de l'information. Cette information sera utilisée afin de corriger certains champs éuleriens.

Les principaux résultats obtenus avec les modèles LES d'atomisation seront exposés dans le dernier chapitre. Les résultats sont comparés à une simulation DNS et à des résultats expérimentaux sur une configuration proche de l'injecteur Diesel. Les comparaisons sont effectuées sur la dispersion du spray et sur la vitesse interfaciale. Enfin

une analyse des méthodes numériques liées à la LES des écoulements liquide/gaz est proposée.

Chapitre 1

État de l'art de l'atomisation

Dans ce chapitre nous présenterons dans un premier temps le processus d'atomisation étudié durant cette thèse. Puis nous détaillerons les méthodes numériques utilisées pour simuler ce processus d'atomisation.

Cependant l'étude de l'atomisation est un phénomène complexe. La description complète des problématiques : physique, théorique, de modélisation physique et numérique est trop vaste pour être abordée intégralement dans ce manuscrit. C'est pourquoi seuls les éléments importants pour restituer le travail présenté dans cet immense champ d'investigation sont présentés.

1.1 Processus d'atomisation

Il existe une multitude de façons d'atomiser un jet liquide. Un jet liquide peut être déstabilisé par sa tension de surface, par sa turbulence interne, par un jet gazeux ou de façon mécanique. Ceci explique la large variété d'injecteurs existants. Cette partie a pour but d'en présenter brièvement les points essentiels, des revues plus générales sur la physique de l'atomisation (Villermaux [12]), voire sur la physique des jets liquides en général (Eggers et Villermaux[13]) sont disponibles dans la littérature.

Malgré ceci, le spray peut être caractérisé par certaines grandeurs physiques générales qui sont :

- **Les forces aérodynamiques**, qui dépendent des quantités de mouvement des différentes phases présentes.
- **La tension de surface**, qui représente les forces moléculaires intervenant au niveau de l'interface liquide/gaz. Cette force a plutôt tendance à "retenir" le li-

quide et à empêcher le phénomène de rupture sauf pour le cas de l'instabilité de Raleigh-Plateau.

- **La viscosité**, permet de rendre compte de la dissipation de l'énergie cinétique du gaz et du liquide et du transfert de la quantité de mouvement entre liquide et gaz.

1.1.1 Nombres adimensionnels

La comparaison des différentes forces permet de comprendre la contribution relative de celles-ci sur le processus de fractionnement du jet liquide. Il est donc intéressant de définir des nombres adimensionnels permettant de caractériser ces différentes contributions.

Le nombre de Reynolds, Re : Ce nombre de Reynolds représente le rapport entre les forces d'inertie et les forces visqueuses. On le définit de la manière suivante :

$$Re = \frac{\text{Forces d'inertie}}{\text{Forces visqueuses}} = \frac{uL}{\nu} \quad (1.1)$$

où u et L correspondent respectivement à une vitesse et une longueur caractéristiques de l'écoulement, ν est une viscosité cinématique caractéristique. Concernant les écoulements liquides/gaz et plus particulièrement l'atomisation, il est possible de définir plusieurs nombres de Reynolds. Comme un nombre de Reynolds de "glissement" pour une goutte d , exprimé comme :

$$Re_g = \frac{|u_d - u_g|D_d}{\nu_g} \quad (1.2)$$

Où u_d et u_g sont les vitesses de la goutte et du gaz porteur, D_d le diamètre de la goutte et ν_d la viscosité cinématique du gaz porteur.

Il est également possible de définir un nombre de Reynolds "liquide", pour un spray :

$$Re_l = \frac{u_d D_0}{\nu_l} \quad (1.3)$$

Avec, u_d la vitesse d'injection, D_0 le diamètre d'injection et ν_l la viscosité cinématique du liquide. Celui-ci rejoint le nombre de Reynolds que l'on définit de manière classique dans le cadre des écoulements monophasiques, pour les jet gazeux par

exemple.

Il est à noter que pour le reste du manuscrit les indices "l" et "g" feront respectivement référence au liquide et au gaz.

Le nombre de Weber, We : Il correspond au rapport des forces d'inertie et de la tension superficielle. On le définit de la manière suivante :

$$We = \frac{\text{Forces d'inertie}}{\text{Force de tension de surface}} = \frac{\rho u^2 L}{\sigma} \quad (1.4)$$

Où ρ est une masse volumique de référence et σ est le coefficient de tension de surface liquide/gaz.

Tout comme pour le nombre de Reynolds, il est possible de définir plusieurs nombres de Weber. Il est donc possible de définir un Weber de "glissement" pour une goutte d , comme :

$$We_g = \frac{\rho_g (u_d - u_g)^2 D_0}{\sigma} \quad (1.5)$$

Par exemple si une goutte a un nombre de Weber supérieur à 12, elle se déstabilisera en de nombreuses autres petites gouttes. Il est aussi possible de définir un Weber "liquide", plus global, pour un jet atomisé en utilisant la vitesse débitante u_d et le diamètre d'injection D_0 :

$$We_l = \frac{\rho_l u_d^2 D_0}{\sigma} \quad (1.6)$$

Le nombre d'Ohnesorge Oh , est la combinaison des nombres de Weber et de Reynolds. Il est défini de la façon suivante :

$$Oh = \frac{\sqrt{We}}{Re} \quad (1.7)$$

Il représente le rapport de la force de viscosité interne de la goutte sur les forces de tension superficielle et aérodynamique. Il caractérise par exemple la capacité d'une goutte à résister à la collision par dissipation visqueuse de l'énergie cinétique.

$$Oh = \frac{\text{Forces visqueuses liquides}}{\text{Forces d'inertie}^{\frac{1}{2}} \text{ Force de tension de surface}^{\frac{1}{2}}} \quad (1.8)$$

1.1.2 Paramètre influençant l'atomisation primaire

Dans cette section on s'intéresse aux différents phénomènes qui influent, d'une manière ou d'une autre, l'atomisation primaire pour des jets haute pression. Pour rappel l'atomisation primaire correspond à la zone où le coeur liquide est déstabilisé ce qui mène à la formation des premières structures liquides.

D'après le livre de Baumgarten [14], différents mécanismes peuvent être à l'origine de l'atomisation primaire pour des injecteurs haute pression et ceux-ci peuvent être résumés sur la figure suivante 1.1.

- **Instabilités dues aux forces aérodynamiques** : Le différentiel de vitesse entre la phase liquide et gazeuse est très important, provoquant ainsi un effet de cisaillement important au niveau de l'interface. Cet effet va amplifier les perturbations qui pouvaient exister à la surface du jet. Ces perturbations peuvent ainsi devenir instables et contribuer à l'arrachement de structures liquides tel que des ligaments ou des gouttes. Cependant ces forces aérodynamiques n'ont un effet que sur la surface du jet et n'impactent pas le coeur de celui-ci. De ce fait, ce phénomène n'explique pas totalement le processus d'atomisation primaire.
- **Le phénomène de turbulence** : La turbulence interne du jet liquide (générée par l'écoulement au sein de l'injecteur) joue un rôle important dans le développement de l'atomisation primaire, comme l'ont révélé les travaux de Wu et Faeth [15] et Wu et al [16]. Celle-ci est généralement générée par l'écoulement dans l'injecteur qui dépend fortement de la forme géométrique de celui-ci. Si des fluctuations turbulentes de vitesse apparaissent, celles-ci peuvent amener la déstabilisation de l'interface liquide/gaz et générer la formation de paquets liquides.
- **Relaxation du profil de vitesse** : Un autre processus pouvant jouer sur l'atomisation primaire est la relaxation du profil de vitesse en sortie d'injecteur. En effet il est possible que le profil de vitesse change brusquement en sortie d'injecteur à cause du changement de conditions limites (passage : parois -> air libre). Ces changements brusques peuvent provoquer une déstabilisation ou l'arrachement de paquets de liquide comme l'ont montré les travaux de Faeth et al. [17].
- **Le phénomène de cavitation** : Le dernier mécanisme pouvant influencer l'ato-

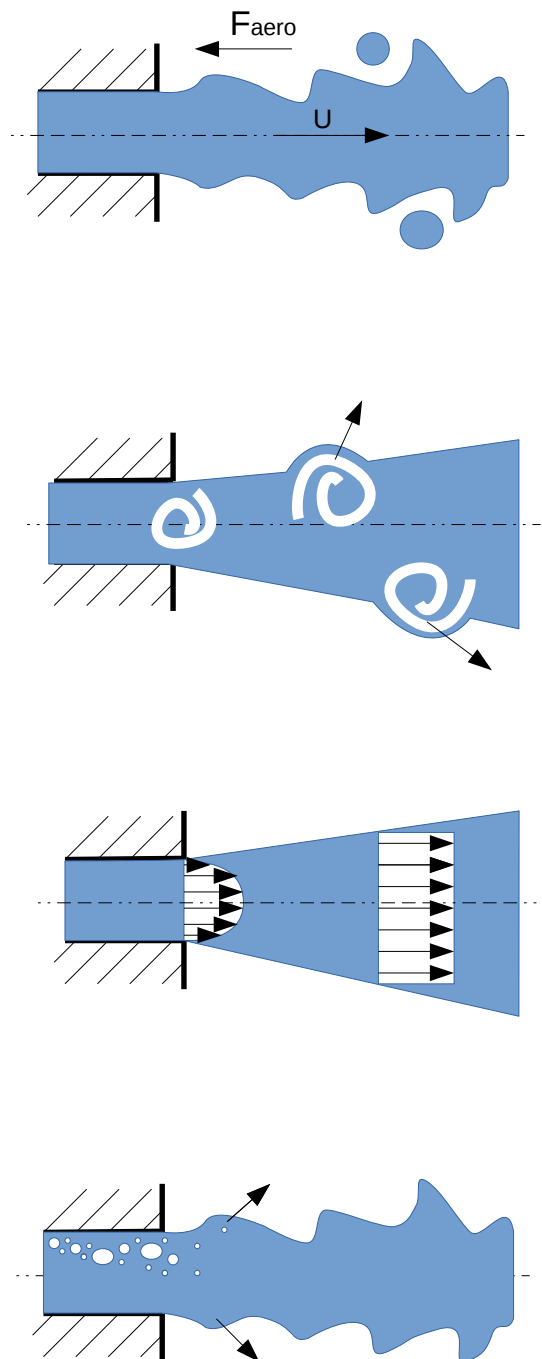


FIGURE 1.1 – Schématisation des différents processus pouvant mener à l'atomisation primaire d'après Baumgarten. (a) Les forces aérodynamiques, (b) Le phénomène de turbulence, (c) Relaxation du profil de vitesse et (d) cavitation.

misation primaire est le phénomène de cavitation. Dans la buse de l'injecteur il peut arriver que la pression devienne inférieure à la pression de vapeur saturante et des bulles de vapeur sont susceptibles de se former. Les bulles peuvent changer complètement le comportement du liquide et, en implosant, la bulle peut émettre une onde de choc dans le liquide qui déstabilisera l'interface. D'après Reitz [18], la cavitation conduit à une augmentation de l'angle du spray et à une diminution de la longueur de pénétration du jet liquide.

1.1.3 Paramètres morphologiques du spray

La formation du spray est très délicate à appréhender. A défaut d'étudier des paramètres relativement complexes, il est possible dans une première approche, d'étudier des paramètres globaux de forme des jets [19]. Les principaux paramètres du spray sont les suivants :

- **Pénétration**, La pénétration du front de jet est définie par la distance entre le nez de l'injecteur et le point le plus éloigné sur le contour du jet figure 1.2. La pénétration d'un spray est de première importance pour le design par exemple des chambres de combustion. Une pénétration trop grande engendre le risque d'un contact du jet liquide avec les parois du moteur. Ceci peut être acceptable si les parois sont suffisamment chaudes et que l'entraînement d'air est important mais dans la plupart des situations d'une telle injection ceci n'est pas le cas. Par conséquent une pénétration trop grande va entraîner un contact avec les parois. D'un autre côté, si la pénétration n'est pas optimale, alors le mélange air – carburant ne sera pas bon. Les meilleures performances moteur sont obtenues quand la pénétration est adaptée à la taille et à la géométrie de la chambre de combustion.
- **Angle**. Plusieurs définitions pour l'angle du spray existent. La première (celle que nous retiendrons) consiste en l'angle sous-tendu par les droites passant par les points dessinés entre le nez de l'injecteur et le point sur la périphérie du jet à une distance équivalente à 60% de la longueur du jet [20]. La seconde définie par Bae [21], est l'angle entre les deux droites passant par les points sur les contours du jet à 50% de la longueur de pénétration. L'angle du spray a une influence importante sur les performances à l'allumage, les limites du front de flamme et l'émission de suie et de fumée.

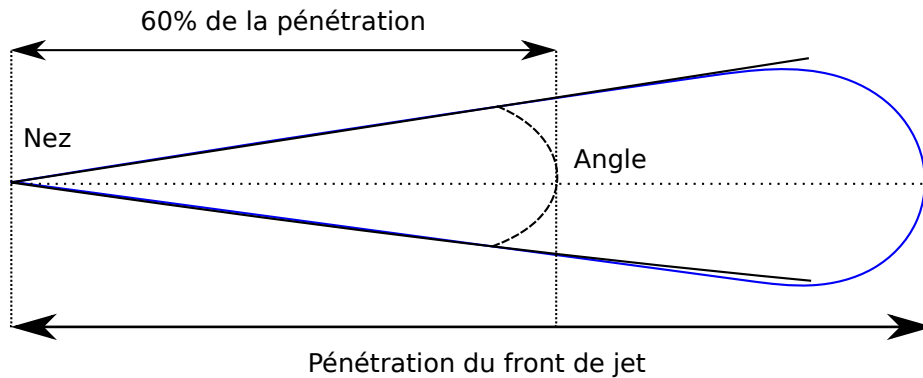


FIGURE 1.2 – Paramètres morphologiques d'un spray

1.2 Approche Numérique

Dans cette section, nous présentons les trois formalismes principaux utilisés pour résoudre numériquement le processus d'atomisation avec une résolution de l'écoulement fluides depuis le début de l'injection. Puis nous détaillerons les méthodes numériques permettant de prendre en compte l'interface liquide/gaz.

1.2.1 Modélisation des équations de Navier-Stokes

La simulation numérique de la mécanique des fluides (computational fluid dynamics (CFD)), consiste à étudier l'évolution spatiale et temporelle d'un fluide par la résolution numérique des équations régissant le fluide. En fonction des approximations choisies, qui sont en général le résultat d'un compromis en terme de précision physique par rapport aux ressources de calcul et des modèles disponibles, les équations résolues peuvent être les équations de Navier-Stokes ou une version simplifiée de ces dernières (incompressible, stationnaire, non-visqueuse, etc)

Si l'on prend l'exemple d'un écoulement monophasique, incompressible et isotherme le système se réduit alors à :

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1.9)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] \quad (1.10)$$

L'équation 1.9 correspond au bilan de masse alors que l'équation 1.10 correspond elle à la conservation de la quantité de mouvement. u_i est la vitesse du fluide dans la direc-

tion i ($i=1,2,3$), P est la pression du fluide, μ est la viscosité dynamique et ρ la masse volumique.

Le système présenté est aussi susceptible d'être modifié si l'écoulement est plus complexe. De nouvelles équations peuvent intervenir dans le cadre d'écoulements réactifs ou d'écoulements multi-fluides. De plus les phénomènes de turbulence sont généralement présents alors que les écoulements laminaires sont l'exception. Il existe essentiellement trois manières de caractériser la turbulence en mécanique des fluides numérique.

- La première méthode consiste à avoir un maillage plus fin que le plus petit tourbillon attendu. On parle de simulation numérique directe (DNS, direct numerical simulation). Cette méthode est extrêmement gourmande en ressources et en temps de calcul. Elle est donc rarement utilisée dans un contexte industriel.
- La simulation des grandes échelles (SGE, ou LES, large eddy simulation) : le maillage est plus grossier qu'en DNS, les tourbillons plus fins que le maillage et leurs impacts sont pris en compte par un modèle physique de sous maille. Seuls les grand tourbillons sont simulés.
- Les équations de Navier-Stokes moyennées pour toutes les échelles conduisent à l'approche RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes). Dans cette approche aucune fluctuation n'est calculée. Leur effet doit être pris en compte par des modèles.

En Figure 1.3 se trouve un récapitulatif des différents formalismes (DNS, LES, RANS) utilisés pour résoudre l'atomisation primaire, avec les échelles correspondant à chaque simulation. Le modèle utilisé est le modèle ELSA [22] [3] dans cette illustration.

1.2.1.a Simulation numérique directe

La simulation numérique directe (DNS) est une résolution numérique des équations tridimensionnelles instationnaires de Navier-Stokes, obtenue sans aucune modélisation physique. Le terme « directe » fait référence au fait que toutes les échelles de temps et d'espace de l'écoulement sont simulées. Toutes les échelles spatiales de la turbulence doivent être résolues dans le domaine de calcul. Cela va de la plus petite échelle dissipative l_d (échelle de Kolmogorov) à l'échelle intégrale L , caractéristique de l'écoulement moyen ou de la géométrie de celui-ci.

Pour être en mesure de capturer tous les phénomènes physiques liés aux échelles

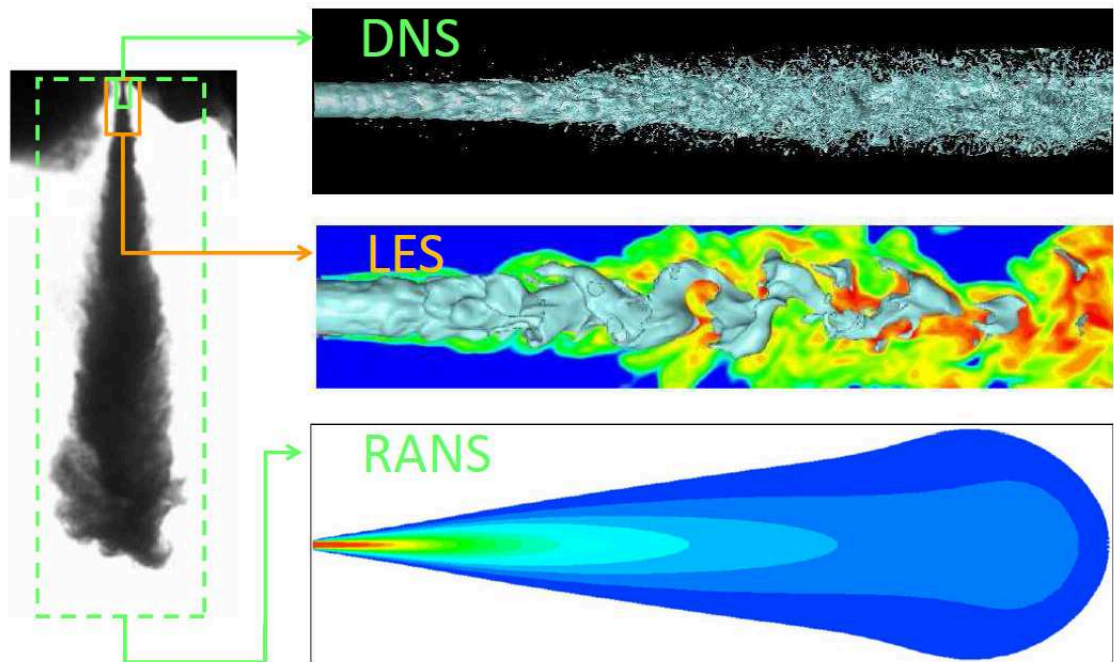


FIGURE 1.3 – Récapitulatif des différents formalismes utilisés pour la simulation et la modélisation de l’atomisation primaire. Représentation des échelles résolues par chaque formalisme (comparé à un jet expérimental à gauche). Utilisation du modèle ELSA pour les formalismes LES et RANS. De haut en bas : DNS de Menard et al. [1], LES de Chesnel et al. [2], simulation RANS de Lebas et al. [3] (Thèse Benjamin Duret)

dissipatives les plus fines, le maillage doit être très raffiné. Il est communément admis que la longueur l_d doit être décrite par un nombre de points n variant entre 4 et 6. De plus en considérant $l_d \ll L$ et l’analyse de Kolmogorov qui donne $L/l_d \approx Re^{3/4}$, le nombre total de points de discrétisation du maillage, N , nécessaire pour résoudre toutes les échelles en trois dimensions s’exprime par :

$$N = \left(\frac{L}{l_d/n}\right)^3 \approx n^3 Re^{9/4} \quad (1.11)$$

Cela signifie que doubler le nombre de Reynolds, multiplie par $2^{9/4} = 4.75$ le nombre de points nécessaires pour capturer l’écoulement dans son ensemble. Cette augmentation exponentielle peut être problématique pour la mémoire des supercalculateurs. De plus une augmentation du Reynolds signifie une diminution de l’échelle dissipative impliquant ainsi un temps caractéristique de la turbulence plus faible. Il est possible de montrer que le nombre de pas de temps grandit suivant une loi ex-

ponentielle en fonction de nombre de Reynolds. Le nombre total d'opérations (spatiales/temporelles) pour une simulation numérique est proportionnel à $\sim Re^3$.

Le coût d'une simulation numérique directe est très élevé, même pour des bas nombres de Reynolds. Pour des nombres de Reynolds plus importants, comme dans le cadre de l'atomisation et du spray, la DNS est impossible ou doit se limiter à un domaine très restreint empêchant ainsi une caractérisation de l'ensemble du processus d'atomisation.

1.2.1.b Simulation aux grandes échelles

La Simulation des Grandes Échelles consiste à simuler un écoulement turbulent en définissant une échelle de longueur de coupure, $\bar{\Delta}$, au-delà de laquelle l'énergie due aux mouvements tourbillonnaires est prise en compte par un modèle dit modèle de sous-maille. En clair, les plus gros tourbillons sont calculés (ils sont physiquement représentés dans le domaine de calcul), les plus petits sont pris en compte en introduisant une viscosité supplémentaire.

Ce procédé implique un filtrage spatial [23]. L'opération de filtrage se définit comme une convolution spatiale par un filtre G de taille caractéristique $\bar{\Delta}$. L'expression filtrée \bar{f} d'une variable quelconque f est donc :

$$\bar{f}(x, y, z) = \iiint_{-\infty}^{+\infty} G_{\bar{\Delta}}(x - x', y - y', z - z') f(x', y', z') dx' dy' dz' \quad (1.12)$$

L'opération de filtrage peut être appliquée aux équations de Navier-Stokes. Si on reprend le cas d'un écoulement monophasique, incompressible et isotherme le système sera alors :

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1.13)$$

$$\frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho \overline{u_i u_j}}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (1.14)$$

L'équation 1.13 correspond au bilan de masse alors que l'équation 1.14 correspond à la conservation de la quantité de mouvement des grandes échelles. Les inconnues de notre système d'équations sont maintenant la vitesse filtrée \bar{u}_i et la pression filtrée \bar{P} . Le terme corrélé d'advection $\overline{u_i u_j}$, de l'équation de la conservation de mouvement, est la principale difficulté de la modélisation LES. Ce terme peut être réécrit comme :

$$\overline{u_i u_j} = \tau_{ij} + \bar{u}_i \bar{u}_j \quad (1.15)$$

Avec τ_{ij} le tenseur de sous maille. On peut alors réécrire l'équation 1.14 sous la forme :

$$\frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial \rho \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (1.16)$$

Le terme non-fermé $\partial \tau_{ij} / \partial x_j$ rend compte des interactions des petites échelles avec les échelles résolues (i.e $> \bar{\Delta}$). Ce terme doit être modélisé, pour assurer la fermeture du système. Nous reviendrons sur les modélisations possibles de ce terme dans le chapitre 3.

Le coût numérique d'une simulation LES est beaucoup moins important que celui d'une DNS, il est donc possible d'envisager la simulation d'écoulement avec de grands nombres de Reynolds.

1.2.1.c Le formalisme RANS

Ce formalisme est basé sur les équations de Navier-Stokes moyennées [24]. Chaque écoulement turbulent est différent. Avec cette méthode, on cherche à déterminer la moyenne d'ensemble d'écoulements turbulents. La décomposition de Reynolds consiste à séparer une variable (comme u) en sa valeur moyenne (\bar{u}) et ses fluctuations (u'), telle que :

$$u = \bar{u} + u' \quad (1.17)$$

On cherche à obtenir les variables moyennées \bar{u}_i et \bar{P} . Si on se replace dans le cadre d'un écoulement d'un écoulement monophasique, incompressible et isotherme, le système d'équations à résoudre est le suivant :

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1.18)$$

$$\frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{\rho u'_i u'_j}}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (1.19)$$

Un tenseur non fermé, appelé tenseur de Reynolds, apparait dans l'équation de la conservation de la quantité de mouvement, $R_{ij} = \overline{u'_i u'_j}$. Ce tenseur démontre que l'on ne peut pas caractériser un écoulement uniquement par ses valeurs moyennes, tel que

\bar{u}_i ou \bar{P} . Si l'on souhaite prédire l'évolution d'un écoulement turbulent, il faut prendre en compte l'effet des mouvements stochastiques.

La fermeture du tenseur de Reynolds est réalisée grâce à un modèle de turbulence. Le modèle utilisé diffère suivant les différents types d'écoulements. Cependant un des modèles le plus courant est le modèle $k - \epsilon$, issu des travaux de Launder [25]. Ce modèle implique la résolution de deux équations supplémentaires pour k et ϵ .

Le formalisme RANS permet de réduire considérablement le coût numérique des simulations par rapport à la DNS ou encore à la LES. Il est ainsi possible de réaliser des applications plus complexes, en terme de géométrie ou avec un nombre de Reynolds plus important. De plus dans le cas d'un écoulement stationnaire la simulation RANS permet d'atteindre la solution convergée beaucoup plus rapidement. Cependant les modèles RANS sont très spécifiques puisqu'ils modélisent toute la dynamique des échelles de la turbulence. Ainsi il est difficile de développer un modèle universel et il faut souvent paramétriser le modèle suivant les particularités de l'écoulement étudié. Plus le modèle de turbulence sera précis, plus le système d'équations sera complexe comme par exemple le modèle $R_{ij} - \epsilon$ qui demande 10 équations de transport supplémentaires de 81 paramètres à ajuster.

De plus la puissance des ordinateurs nous permet de décrire des écoulements de façon plus détaillée. Seules les approches DNS ou LES ont un formalisme permettant de tirer partie de cette augmentation de puissance. C'est sans doute la raison la plus importante pour se concentrer sur les approches LES et DNS en recherche.

1.2.2 Prise en compte d'une Interface

Une des problématiques majeures des écoulements diphasiques est de prendre en compte l'interaction de l'interface avec l'écoulement des fluides généralement turbulents qui la composent.

À la surface d'un milieu liquide, la matière n'est pas, localement, rigoureusement dans le même état. Ce nouvel état local a une énergie légèrement supérieure. À la surface ou interface est donc associée une certaine énergie par unité de surface dont l'origine est la force de cohésion entre molécules identiques. On parle alors de tension de surface.

La description d'écoulements diphasiques nécessite de prendre en considération cette force de tension de surface dans l'équation de la conservation de la quantité de mouvement et les sauts de grandeurs physiques qui interviennent à l'interface. Or cette force est surfacique dans le sens où elle s'exprime uniquement sur l'interface. Il est donc difficile de la prendre en compte avec les méthodes basées sur des bilans volumiques qui servent généralement à résoudre les équations de la masse et de la quantité de mouvement. On peut exprimer la force de tension de surface dans la direction i : $F_\sigma = \sigma \kappa \delta_\Gamma n_i$ où σ est le coefficient de tension de surface, κ la courbure de l'interface, n_i la composante en i de sa normale et enfin δ_Γ est une fonction de Dirac centrée sur la position de l'interface. Ainsi pour prendre en compte cette force il faut être capable de "localiser" l'interface et ceci est fait via une méthode de suivi d'interface.

Dans la section qui suit, nous faisons quelques rappels sur les méthodes de suivi d'interface en insistant notamment sur les méthodes LevelSet, VOF et compression d'interface. Cela nous permet d'introduire les principaux avantages et inconvénients de ces méthodes.

1.2.2.a Méthodes VOF

Historiquement la méthode VOF (Volume of Fluid) a été développée par Hirt [9] pour résoudre des écoulements diphasiques entre phases non miscibles. La caractéristique première des méthodes VOF est de travailler directement sur la représentation discontinue associée à la variable α définie comme :

$$\alpha = \frac{V_l}{V} \quad (1.20)$$

Avec V_l le volume de liquide dans la cellule et V le volume total de la cellule. Les méthodes VOF se bornent à travailler directement sur le problème d'advection qui se résume à résoudre :

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \frac{\partial u_i \alpha}{\partial x_i} = 0 \quad (1.21)$$

La définition d'une méthode VOF nécessite deux éléments clés :

- une méthode de reconstruction explicite de l'interface.
- une méthode de définition des flux volumes finis utilisant de manière consistante la reconstruction explicite précédente.

Il existe de nombreuses méthodes de reconstruction de l'interface [26, 27, 28] ... et encore bien plus de méthodes de définition des flux [1, 29].

Concernant la question de la reconstruction explicite de l'interface, la première question à se poser est celle de la définition de l'interface Γ dans la représentation VOF. En effet, nous n'avons à priori pas accès de manière simple à cette interface. L'information basique associée à α est la suivante :

$$\begin{cases} \alpha = 1 & \iff \text{phase liquide,} \\ \alpha = 0 & \iff \text{phase gazeuse,} \\ \alpha \in]0; 1[& \iff \text{contient l'interface,} \end{cases}$$

On peut considérer que cette information permet de *localiser* l'interface mais pas de la *définir* de manière explicite. Pour cela, des méthodes spécifiques ont été développées. Une des premières méthodes de reconstruction d'interface est la méthode SLIC (Simple Line Interface Calculation) de Noh et Woodward [30]. Dans cette méthode, l'interface est représentée dans chaque cellule du maillage (supposé cartésien) à l'aide de plans alignés avec l'une des directions du maillage. Cette représentation de l'interface dépend du sens de l'écoulement (i.e du champ de vitesse) vis à vis des axes du repère (figure (1.4) milieu). La méthode SLIC est malheureusement d'un ordre insuffisant dans la pratique. Il est préférable de représenter l'interface par un plan non nécessairement parallèle au maillage, comme sur la figure (1.4) (à droite), en utilisant la méthode de reconstruction PLIC [31] (Piecewise Linear Interface Calculation).

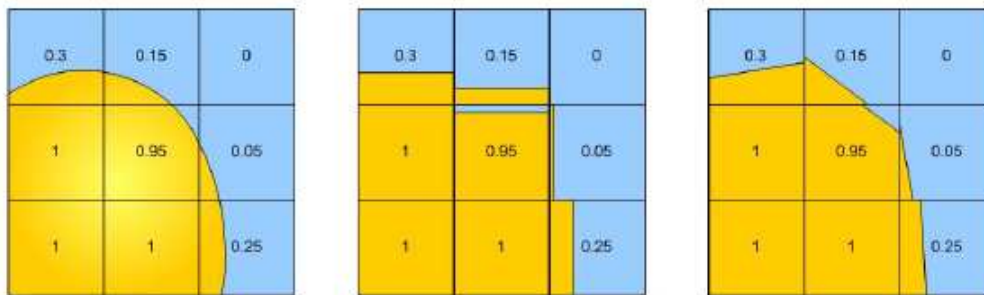


FIGURE 1.4 – Principe de la méthode VOF. A gauche : interface réelle et fonction α associée ; Au milieu : reconstruction SLIC ; A droite : reconstruction PLIC

Dans la méthode PLIC, l'interface sur une cellule est représentée localement par un

plan non nécessairement vertical ou horizontal. Sa définition nécessite le calcul de la normale. Encore une fois, diverses méthodes existent pour calculer cette normale. Toutes ces méthodes utilisent une estimation du gradient de α pour calculer la normale. Ceci est en accord avec la relation fondamentale suivante :

$$\frac{\nabla\alpha}{|\nabla\alpha|} = \vec{n}. \quad (1.22)$$

A titre d'exemple, la méthode de base est celle de Youngs [32] qui consiste à utiliser directement l'équation 1.22, le gradient étant estimé par une formule type Green-Gauss classique. Cette méthode est d'ordre 1. Une méthode d'ordre 2 couramment utilisée est la méthode dite LVIRA [33] (Least-square Volume-of-fluid Interface Reconstruction Algorithm).

Une fois l'interface reconstruite, il reste à définir les flux volumes finis. Cela se fait généralement en introduisant des algorithmes à forte connotation géométrique et lagrangienne. Il convient de distinguer les maillages cartésiens, pour lesquels on peut mettre en place assez naturellement une approche de résolution temporelle de type *splitting* basée sur la séparation des coordonnées spatiales. C'est le choix réalisé au sein du code ARCHER [1, 4], des maillages non-structurés pour lesquels une approche *unsplit* est nécessaire.

L'avantage des méthodes VOF est leur caractère conservatif. Par contre, comme nous venons de le voir, leur implémentation sur des maillages 3D non-structurés peut être très complexe. L'inconvénient de l'approche VOF est que de par sa construction même, l'interface est représentée de manière discontinue (ainsi, dans l'approche PLIC, les différents triangles issus de la construction explicite de l'interface sont discontinus d'un élément à l'autre). Cette irrégularité limite intrinsèquement la précision accessible.

1.2.2.b Méthodes LevelSet

La méthode LevelSet a été introduite par Osher et Sethian en 1988 [34]. Son principe consiste à définir l'interface Γ de manière implicite comme l'iso-contour de niveau zéro d'une fonction φ aussi régulière que possible. Bien que de nombreux choix soient envisageables pour φ , le plus classique repose sur la définition de φ comme la distance signée à l'interface, souvent notée d^s .

La figure (3.9) montre la différence de point de vue entre une représentation de type fonction discontinue type VOF et une représentation de type LevelSet.

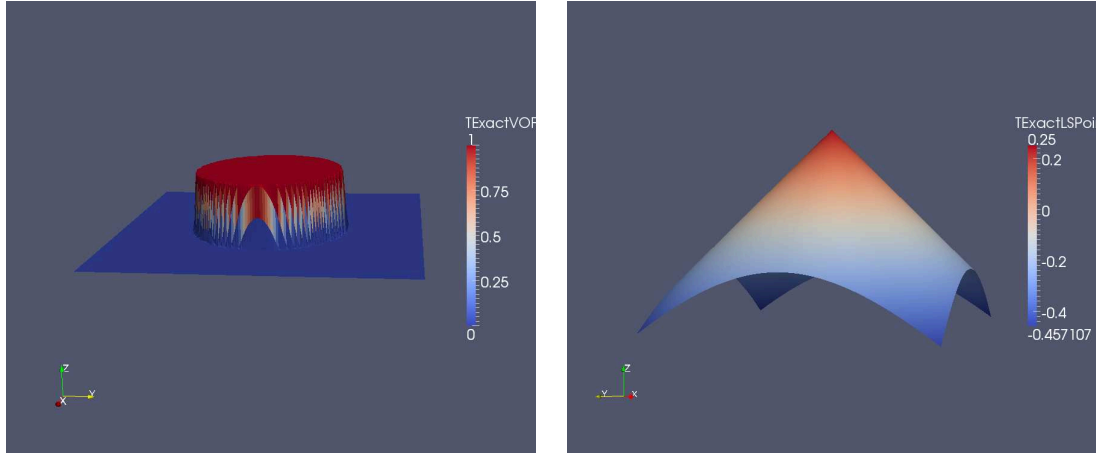


FIGURE 1.5 – Différents types de représentations : VOF à gauche et levelSet à droite

Si la notion de distance à une interface ne nécessite que peu d'hypothèses sur la nature de l'interface, la notion de distance signée nécessite quand à elle que l'interface considérée définisse de manière univoque une partition de l'espace ambiant. Cela étant bien le cas pour notre problématique initiale, parler de distance signée à l'interface a donc un sens. Ainsi, pour un point x quelconque, le signe de la fonction distance dépend du domaine dans lequel se trouve ce point x , comme schématisé sur la figure (1.6).

Un des intérêts majeurs d'une représentation LevelSet est de donner accès de manière naturelle à l'ensemble des caractéristiques géométriques inhérentes non seulement à l'interface Γ mais aussi à tous les iso-contours de φ . Deux quantités très importantes à déterminer sont la normale \vec{n} à l'interface et la courbure moyenne κ . Dans une représentation LevelSet, elles sont définies via :

$$\vec{n} = \frac{\nabla\varphi}{|\nabla\varphi|} \quad (1.23)$$

$$\kappa = \nabla \cdot \vec{n} = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla\varphi}{|\nabla\varphi|} \right) \quad (1.24)$$

Dans le cas où φ est définie par d^s , ces formules se simplifient en :

$$\vec{n} = \nabla d^s \quad \text{et} \quad \kappa = \Delta d^s \quad (1.25)$$

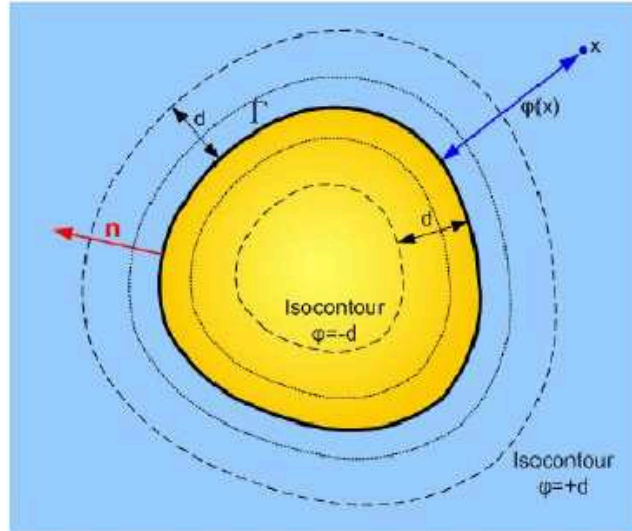


FIGURE 1.6 – Définition de la LevelSet permettant de localiser une interface Γ

De nombreuses autres propriétés géométriques peuvent être exprimées simplement à l'aide d'une représentation LevelSet. Pour une étude théorique approfondie (tant du point de vue géométrique que du point de vue analytique), la lecture de l'ouvrage de référence de Zolesio [35] est possible.

Au niveau numérique proprement dit, le grand intérêt de la représentation LevelSet est la continuité inhérente de φ en opposition à la représentation discontinue de la méthode VOF. En plus de permettre un calcul précis de quantités géométriques importantes (i.e \vec{n} et κ), cette continuité permet théoriquement d'utiliser des schémas de discrétisation spatiale d'ordre élevé pour assurer l'évolution de φ . Ceci est l'avantage principal de l'approche LevelSet. Un autre avantage est que les schémas basés sur une formulation LevelSet ne demandent *a priori* pas la reconstruction explicite de l'interface. Au niveau discret, une telle reconstruction n'est pas de prime abord si évidente. En effet, s'il est facile de *localiser* l'interface (essentiellement en testant le signe de φ sur les arêtes du maillage), il est beaucoup moins simple de la définir explicitement. Cela étant, il est vite apparu que la méthodologie LevelSet souffrait d'au moins deux inconvénients limitant :

- La discrétisation en volumes finis n'est pas conservative au niveau de la va-

riable d'intérêt qui n'est pas directement φ mais $\alpha = H(\varphi)$. C'est le principal inconvénient de l'approche. Il existe aussi des techniques où l'on ne transporte pas φ directement mais $f(\varphi)$ pour essayer de conserver $H(\varphi)$ comme Desjardins [36]. L'objectif principal des méthodes de couplage LevelSet/VOF sera justement d'essayer de corriger ce défaut comme l'ont réalisé Sussman et Puckett [37], Ménard et al. [4].

- La régularité de la LevelSet est difficilement contrôlable au cours du temps. L'exemple typique est le cas d'une donnée initiale φ_0 définie comme la distance signée à l'interface. Cette propriété ne sera généralement pas conservée au cours du temps. Cette perte de régularité au cours de l'évolution dégradera la qualité de la discrétisation spatiale. Pour remédier à cela, une technique classique consiste à *réinitialiser* périodiquement au cours du temps la LevelSet par la distance signée à l'interface courante. Diverses méthodes existent pour arriver à cela comme celle développée par Sethian [38] ou plus récemment par Buscaglia et al. [39] mais aucune d'entre elles n'est totalement satisfaisante.

Soulignons aussi que l'approche LevelSet joue aussi ainsi un rôle fondamental dans les domaines du graphisme, du maillage, de l'interaction fluide-structure...

1.2.2.c Méthodes de compression d'interface

Il existe d'autres méthodes pour suivre l'interface, parmi elles nous nous intéressons aux méthodes de compression d'interface. Ces méthodes gardent une approche discontinue en travaillant directement sur la fraction volumique de liquide α , cependant contrairement aux méthodes VOF, aucune reconstruction de l'interface n'est effectuée. Le principe est de corriger la diffusion numérique de la fraction de liquide de l'équation 1.21 que l'on a en transportant la fraction volumique de liquide qui a un profil discontinu à l'interface. On distingue deux grandes familles de méthodes de compression d'interface :

- Les méthodes de compression d'interface numérique via les schémas numériques.
- Les méthodes de compression d'interface explicite via les équations physiques.

Les méthodes de compression d'interface numérique (on parle souvent de schémas antidiffusifs) travaillent directement sur la formulation continue initiale (1.21), le caractère antidiffusif étant introduit au niveau du schéma numérique lui-même. La grande différence avec les méthodes VOF précédentes est qu'aucune reconstruction explicite

de l'interface n'est exigée [40]. La compression nécessaire pour s'opposer à la diffusion numérique usuelle est obtenue en combinant des méthodes de montée en ordre (à priori instables) avec des techniques de limitations particulières. Trouver le bon équilibre entre résolution de la discontinuité de contact et stabilité du schéma constitue la pierre angulaire du travail.

Les méthodes de compression d'interface explicite consistent à modifier explicitement l'équation (1.21) en y adjoignant un terme censé apporter une compression de l'interface, compression dont le but est de contrebalancer la diffusion numérique générée par la discrétisation via un schéma usuel du terme d'advection ($u \cdot \nabla \alpha$). La méthode native d'OpenFOAM [41] [42] et la méthode d'Olson-Kreiss [43], [44] utilisent ce type de méthode compressive. Nous retiendrons surtout que les méthodes de compression ont comme avantage une implémentation informatique très simple surtout pour des maillages non structurés mais comme inconvénients une certaine difficulté à définir des schémas stables et enfin une précision souvent en deçà des méthodes géométriques. De plus quand les plissements de l'interface ne sont pas résolus, la discontinuité du profil de fraction volumique de liquide se retrouve lissée et la méthode tend vers une méthode d'interface diffuse.

1.2.3 Modélisation de l'atomisation primaire

Les coûts des simulations numériques directes étant très élevés, il n'est pas possible de les utiliser dans des géométries complexes à grande échelle. Notons cependant que des études existent pour des injecteurs simples ou une DNS modèle est utilisée dans le domaine académique. Quand il n'est pas possible d'utiliser l'approche DNS c'est la modélisation qui est utilisée. Cela permet d'étudier le développement du spray de l'atomisation primaire à la zone diluée. Dans ce formalisme, l'atomisation primaire est assimilée à une condition d'injection, dont le résultat est la production de gouttelettes sphériques que l'on suivra de manière Lagrangienne. Il est important de rappeler que l'hypothèse de sphéricité n'est pas applicable dans cette région. Par conséquent, la description de cette région nécessite des modèles spécifiques. Dans ce paragraphe nous détaillons uniquement les principaux modèles dédiés à l'atomisation primaire.

Concernant la zone dense, l'un des modèles le plus représentatif est le modèle WAVE. Initialement proposé par Reitz [7], ce modèle se base sur la naissance des instabilités de type Kelvin-Helmoltz dans la configuration d'un injecteur à jet rond cylindrique. Initialement, on injecte un "jet rond" de liquide qui va se fragmenter en fonction

de la longueur d'onde et du taux d'accroissement des modèles les plus instables. Ces deux quantités sont liées principalement au nombre de Weber et d'Ohnesorge. La décomposition de ce "jet rond" crée des gouttes sphériques d'un rayon dépendant de la longueur d'onde de l'instabilité. Cette fragmentation n'est pas instantanée, elle est réalisée pendant un temps de rupture, lui aussi donné par une corrélation (voir Figure 1.7). Comme pour la plupart des modèles, celui ci contient des paramètres spécifiques à la simulation effectuée. De plus ce modèle n'est pas complètement fidèle à la topologie classique de l'atomisation primaire, c'est à dire un coeur liquide où les instabilités créent des ligaments et seulement une faible proportion de gouttelettes sphériques.

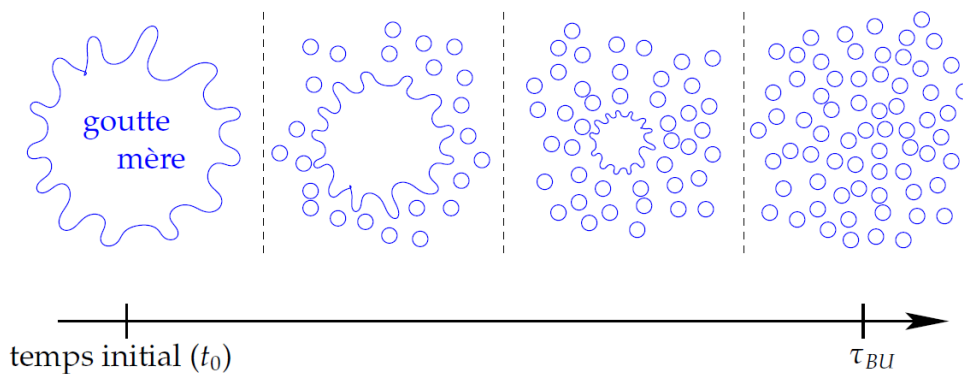


FIGURE 1.7 – Désintégration d'un jet rond selon le modèle WAVE.

Un autre modèle, proposé par Gorokhovski et al. [45, 46, 47], utilise un formalisme stochastique pour représenter le coeur liquide et les structures liquides. Cette approche se rapproche de celle utilisée par Kolmogorov pour la turbulence [48], mais dans le contexte de l'atomisation. On suppose une fréquence de fragmentation du coeur liquide très élevée pour considérer qu'elle obéit à un phénomène de "rupture en cascade" (hypothèse de similarité d'échelles). Des parcelles stochastiques sont introduites dans le domaine gazeux et suivies par une approche Lagrangienne. A partir de leur trajectoire et leur temps de vie, il est possible de connaître leur appartenance au coeur liquide et par conséquent d'obtenir la fraction volumique moyenne de liquide dans les cellules considérées.

Il existe un autre modèle pour simuler l'atomisation primaire : le modèle ELSA (Eulerian Lagrangian model for Spray and Atomization). Ce modèle repose sur la description de l'écoulement diphasique en zone dense comme en zone diluée. Initialement proposé par Vallet et Borghi en 1999 [49, 22, 50] puis repris par Lebas [3], ce modèle

utilise une grandeur plus générale et plus adaptée à la morphologie d'un spray dense (à la place du diamètre des gouttes) : la densité d'interface. Cette quantité représente le ratio entre la surface de l'interface liquide-gaz et le volume de la cellule considérée. Ainsi, la densité de surface peut traiter aussi bien une gouttelette sphérique, que le coeur liquide très déformé. Dans ce modèle, on présuppose que la turbulence est le moteur du phénomène de rupture du jet, en représentant l'aspect diphasique par un seul fluide contenant un mélange de deux phases. Cette approche est différente du modèle WAVE qui considère que ce sont les instabilités qui jouent un rôle majeur. Celles ci sont prises en compte par la création d'une turbulence diphasique additionnelle. Différents termes sources ou puits sont considérés pour prendre en compte des phénomènes tels que l'évaporation, la rupture et la coalescence par exemple. Nous irons également plus loin dans la présentation de ce modèle dans le chapitre 4.

Ces modèles sont très attractifs et certains sont déjà utilisés par les industriels, cependant, ces modèles nécessitent souvent une calibration pour corroborer avec l'expérience. Ces modèles reposent sur une approche turbulente. Ainsi on retrouve comme en monophasique la difficulté de construire des modélisations universelles permettant de prendre en compte tous les cas.

1.2.4 Modélisation de l'atomisation secondaire

Le but de cette partie n'est pas de dresser une liste exhaustive des modèles d'atomisation secondaire. Il s'agit ici de décrire le fonctionnement d'un modèle classique lagrangien. Il existe beaucoup d'autres modèles disponibles dans la littérature, [51, 52]. Nous décrivons, simplement deux modèles représentatifs. Étant dans la partie secondaire de l'atomisation, il est possible de considérer les gouttes individuellement. La situation est celle d'une goutte isolée soumise aux forces aérodynamiques, dues à une vitesse de glissement entre cette goutte et le gaz environnant.

Le modèle de Reitz Diwakar [53] de fractionnement secondaire a été développé à partir des corrélations obtenues par Nicholls [54]. À partir de ces travaux, Reitz et Diwakar ont proposé de retenir deux types de fractionnement secondaire qui dépendent directement du nombre de Weber gazeux de la goutte.

- **Le bag breakup** ($12 < We_d$) Ce premier régime d'atomisation a lieu pour des nombres de Weber gazeux supérieurs à 12. La goutte est déformée par l'écoulement d'air. Elle forme alors un sac dont la membrane se rompt en petites gouttes, ne laissant intact qu'un anneau qui, lui-même, se fractionne en de plus petites

gouttes.

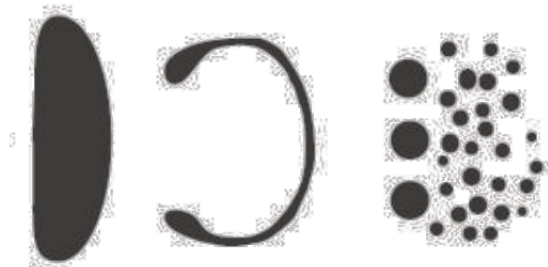


FIGURE 1.8 – Schéma descriptif du bag breakup

- **Le stripping breakup** ($100 < We_d$) Dans cette configuration, le cisaillement avec l'écoulement gazeux est plus intense ; il y a alors arrachage de ligaments liquides sur les bords de la goutte. Ces ligaments sont ensuite rapidement fractionnés en gouttes sphériques.

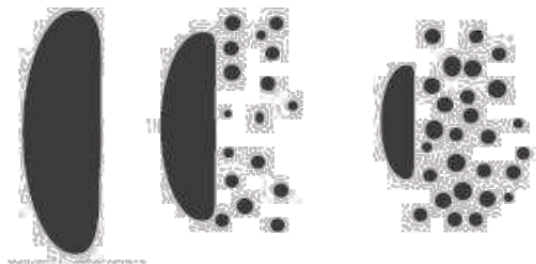


FIGURE 1.9 – Schéma descriptif du stripping breakup

Un autre modèle est connu sous le nom de KH-RT [55], celui ci suggère que la perturbation du liquide est due à deux types d'instabilités : la première instabilité est de type Kelvin-Helmholtz (modèle Wave) et la seconde de type Rayleigh-Taylor [56]. Ces deux instabilités sont mises en concurrence et celle qui conduira au modèle le plus instable sera utilisée pour le fractionnement.

1.2.5 Modélisation du spray dispersé

Les modèles d'atomisation en zone diluée des jets liquides sont essentiellement basés sur une formulation lagrangienne. Cependant, cette formulation ne correspond qu'à l'une des méthodes possibles dédiées au problème général de la résolution de l'équation d'évolution statistique d'un spray constitué de particules sphériques. Ce

problème consiste à trouver de façon générale la distribution de taille, vitesse ou autre caractéristiques du spray à chaque endroit et à chaque instant. Il a été posé mathématiquement, notamment par l'équation de Williams [57]. Pour résoudre ce problème, l'approche basée sur une formulation eulérienne mono ou multifluide(s) est également possible.

1.3 Bilan et conclusions

Dans ce chapitre nous avons étudié les éléments importants du processus d'atomisation pour restituer le travail présenté dans ce manuscrit. Nous nous sommes dans un premier temps intéressés aux phénomènes physiques menant au processus d'atomisation. Puis nous avons rappelé certaines notions sur des nombres adimensionnels permettant d'identifier la contribution de ces phénomènes sur le processus de fractionnement. Les différentes grandeurs caractéristiques d'un jet liquide ont ensuite été explicitées.

Dans un second temps nous avons décrit les méthodes numériques permettant de simuler l'atomisation primaire d'un spray liquide. Nous avons rappelé les différents formalismes, c'est-à-dire DNS, RANS et LES. Puis nous avons listé les avantages/inconvénients de chacune des méthodes. Ceci a permis de mettre en avant la simulation à grande échelle, puisque ce type de formalisme permet d'espérer décrire les instabilités au niveau de l'interface liquide/gaz et permet une réduction du coût cpu importante par rapport à un calcul DNS tout en tirant parti de capacités de calcul accrues.

Enfin nous avons rappelé les différentes méthodes permettant de prendre en compte les interactions liquides/gaz. Nous faisons quelques rappels sur les méthodes de suivi d'interface en insistant notamment sur les méthodes LevelSet, VOF et compressive d'interface. Cela nous permet d'introduire les principaux avantages et inconvénients de ces méthodes, en effet l'approche LevelSet donne de bonnes informations topologiques pour l'interface alors que la méthode VOF est elle naturellement conservative.

Ces différentes méthodes nous ont permis de mettre en évidence les difficultés liées à l'étude de l'atomisation dans un contexte numérique et les solutions envisagées. Un des problèmes majeurs c'est la transition entre la zone dense et la zone dispersée. Il existe déjà des solutions pour cette transition notamment avec la méthode ELSA. Cela

existe aussi avec une approche DNS et Lagrangienne. Dans le chapitre suivant nous nous intéresserons plus particulièrement au problème de sous résolution reliant les équations de Navier-Stokes et les méthodes de suivi d'interface provoquant notamment une perte de masse. Un couplage Eulerien-Lagrangien, sera proposé afin de corriger ce défaut et des analyses sur différentes grandeurs physiques caractéristiques seront réalisées.

Chapitre 2

Couplage des méthodes de suivi d'interface aux méthodes Lagrangiennes

Dans ce chapitre, nous proposons un couplage Euler Lagrange dédié à un code de DNS : ARCHER [1] [4]. De nouvelles équations et méthodes numériques ont été introduites dans le code ARCHER pour prendre en compte un spray dispersé sous forme lagrangienne. Cette approche nous permet d'être strictement conservatif en masse et de proposer des simulations de référence pour les futurs développements du couplage entre les méthodes de suivi d'interface et les méthodes lagrangiennes.

2.1 Introduction

Un des problèmes majeurs de la DNS diphasique est que la résolution nécessaire pour capturer les plus petites échelles d'atomisation est inconnue, contrairement aux échelles de Kolmogorov liées à la turbulence. Même dans les simulations hautes résolutions de Shinjo et al. [5], ou dans les études utilisant des méthodes de raffinement de maillage [58, 59], il est impossible de représenter les plus fines structures d'un jet liquide. Ce problème met en avant la nécessité de réaliser des modèles de sous mailles dédiés aux écoulements diphasiques, pour pouvoir modéliser les plus petites structures liquides. Le passage d'une description résolue Eulérienne à une méthode de spray dispersé, par exemple via une approche Lagrangienne, est un modèle qui tend à représenter l'écoulement autour d'une goutte de façon simplifiée.

L'approche Euler-Lagrange permet de rester dans le cadre des simulations hautes

résolutions c'est pourquoi nous nous sommes orientés vers ce couplage. Le principe du couplage est de transformer les structures liquides trop petites pour être bien représentées via les méthodes de suivi d'interface par des particules modèles lagrangiennes. Cependant cette approche introduit de nouvelles les questions : Quelle méthode numérique utiliser, aussi bien d'un point de vue eulerien que lagrangien ? Comment réaliser numériquement cette transformation Euler/Lagrange ? Quelle est l'influence de cette transformation sur des grandeurs physiques caractéristiques et les lois de conservations ? Nous allons aborder ces questions dans ce chapitre.

2.2 Méthode Numérique

2.2.1 Approche Eulérienne

Les paragraphes suivants détailleront les méthodes numériques utilisées pour la résolution de la partie Eulerienne dans le code ARCHER. Notons que cette section constitue un rappel des méthodes et des équations résolues déjà présentes dans le code ARCHER, développées durant les thèses de Thibault Ménard [1] et de Sébastien Tanguy [60].

2.2.1.a Équations de Navier-Stokes

La description du mouvement est réalisée via une méthode de projection pour résoudre les équations de Navier-Stokes dans leur forme incompressible :

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] + \mathbf{f} + \frac{1}{\rho} \sigma \kappa \delta(G) \vec{n} \quad (2.2)$$

Où P est la pression du fluide, u_i la vitesse dans la direction i , μ la viscosité dynamique, ρ la masse volumique. A l'interface, à l'aide la fonction de Dirac $\delta(G)$ on exprime les forces de tension de surface repérée : σ est la tension de surface, \vec{n} le vecteur normal unitaire, κ est la courbure calculée à partir de la fonction Level Set G (les définitions de κ , \vec{n} et G sont données dans la section suivante). \mathbf{f} correspond à un terme de forçage permettant d'obtenir une turbulence entretenue : Ce terme est détaillé dans la thèse de Benjamin Duret [61].

La masse volumique ρ et la viscosité dynamique μ sont dépendant des phases et sont évaluées avec la fraction volumique de liquide α définie dans la section suivante :

$$\mu = \alpha\mu_l + (1 - \alpha)\mu_g \quad (2.3)$$

$$\rho = \alpha\rho_l + (1 - \alpha)\rho_g \quad (2.4)$$

Les dérivées spatiales pour les termes convectifs sont évaluées à l'aide d'un schéma WENO [62](Weighted Essentially Non-Oscillatory) d'ordre 5 conservatif. Pour les termes diffusifs, un schéma centré d'ordre 2 est employé. L'intégration temporelle est réalisée à l'aide d'un schéma Runge Kutta d'ordre 3 (RK3) [63] [64]. Le maillage utilisé est cartésien, en coordonnées décalées pour les vecteurs vitesses (maillage MAC) [65]. AU contraire de la vitesse les variables scalaires (dont la pression) sont définies au centre des cellules.

La résolution du vecteur u temporel consiste tout d'abord à calculer une vitesse intermédiaire u^* à partir de l'équation de quantité de mouvement, mais en retirant le terme de pression.

$$u_i^* = u_i^n + \Delta t \left(-\frac{\partial u_i u_j}{\partial x_j} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] + f + \frac{1}{\rho} \sigma \kappa \delta(G) \vec{n} \right) \quad (2.5)$$

Cette vitesse intermédiaire ne satisfait pas l'équation de la conservation de la masse ($\nabla \cdot u^* \neq 0$). Nous cherchons donc ensuite à déterminer la vitesse u^{n+1} qui vérifie $\nabla \cdot u^{n+1} = 0$ or nous savons que :

$$u_i^{n+1} = u_i^* - \frac{\Delta t}{\rho} \frac{\partial P^{n+1}}{\partial x_i} \quad (2.6)$$

Et si on applique l'opérateur de divergence sur l'équation précédente, nous obtenons une équation de Poisson pour la pression :

$$\frac{\partial u_i^*}{\partial x_i} = \Delta t \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial P^{n+1}}{\partial x_i} \right) \quad (2.7)$$

Cette équation de Poisson est résolue à l'aide d'un solveur de type Gradient Conjugué [66] avec préconditionnement multigrilles [67, 68]. Notons que la division par la masse volumique introduit une matrice à coefficients non constants, rendant la résolution du système plus ardue (mauvais conditionnement). Enfin, la pression obtenue par le solveur de Poisson est utilisée pour obtenir la vitesse à l'instant t suivant :

$$u_i^{n+1} = u_i^* - \Delta t \frac{1}{\rho} \frac{\partial P^{n+1}}{\partial x_i} \quad (2.8)$$

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

2.2.1.b Méthode de suivi d'interface

Une méthode CLSVOF [29] (Coupled Level-Set VOF) est utilisée dans ARCHER [4] pour suivre l'interface. Cette méthode couple l'approche LevelSet avec une approche de type VOF dans le but de combiner leurs avantages respectifs. Les variables indicatrices de phases présentées sont résolues via :

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \frac{\partial u_i \alpha}{\partial x_i} = 0 \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial u_i \varphi}{\partial x_i} = 0 \quad (2.10)$$

Avec α la fraction volumique de liquide et φ la fonction distance signée.

L'élément clé de cette méthode est d'assurer l'évolution simultanée d'un champ LevelSet φ et d'un champ VOF α tout en imposant qu'à chaque instant ces deux champs soient "compatibles". La méthode a été développée dans un contexte volumes finis pour la fraction volumique de liquide α alors que la distance signée φ est elle définie via une méthode de différence finies. φ et α sont définis sur les mêmes points via une approche centrée cellule. Nous pouvons schématiser la méthode CLSVOF sous la forme suivante :

Description formelle du couplage CLSVOF (2.11)

- 1 on part de φ^n et α^n supposés cohérents
- 2 on advecte $\varphi^n \rightarrow \varphi^{n,1}$ de manière classique : Différence finies Weno
- 3 on advecte $\alpha^n \rightarrow \alpha^{n,1}$ avec une procédure VOF : Volume fini avec flux reconstruit géométriquement
- 4 on corrige localement $\varphi^{n,1} \rightarrow \varphi^{n,2}$ grâce à la fraction volumique de liquide $\alpha^{n,1}$: Procédure géométrique en respectant le volume de liquide et en tirant parti des informations topologique de l'interface grâce à la fonction distance φ
- 5 on redistancie $\varphi^{n,2} \rightarrow \varphi^{n,3}$: en partant de l'interface on corrige le champ φ pour s'assurer que c'est une fonction distance
- 6 on pose $\alpha^{n+1} = \alpha^{n,1}$ et $\varphi^{n+1} = \varphi^{n,3}$

Concernant le point 3, précisons que la méthode profite du cadre cartésien pour utiliser une technique de splitting, introduit par Puckett et al. Pour un transport en 3 dimensions, on commence (par exemple) par transporter la fraction volumique de liquide selon la direction x puis selon la direction y et enfin suivant la troisième direction z .

L'étape 4 de correction, consiste à déplacer le niveau 0 de la fonction distance afin que le volume de liquide obtenu via la fonction LevelSet soit équivalent au volume obtenu via la méthode du VOF.

Concernant l'étape de correction de la fonction distance [69], ARCHER effectue une "redistanciation" classique de la LevelSet via l'équation instationnaire usuelle eq 2.10. Cette réinitialisation ne modifie pas les valeurs de φ sur les cellules proches de l'interface. Soulignons aussi que la résolution de l'équation 2.10 profite du cadre cartésien pour utiliser le schéma WENO-5.

2.2.1.c Traitement des discontinuités :

Les discontinuités à l'interface nécessitent un soin particulier. En général, on emploie le terme de "conditions de saut" lorsque l'on a une discontinuité d'une variable. Les conditions de sauts expriment la relation entre les différentes variables de part et d'autre de la discontinuité. Dans le cas d'un écoulement diphasique air/eau par exemple, on a un saut de masse volumique de l'ordre de 1000 lorsque l'on traverse l'interface. Ces conditions de saut doivent être prises en compte via un formalisme monofluide, c'est à dire qu'un seul jeu d'équations est résolu pour l'ensemble du domaine.

Lors de la résolution des équations nous sommes amenés à estimer des dérivées proches de l'interface. Si le schéma numérique d'une dérivée dans le domaine gazeux nécessite des points dans le liquide, les conditions de saut vont rentrer en jeu pour que les points utilisés prennent en compte le saut de masse volumique par exemple. Nous détaillons les conditions de saut pour une variable A de cette manière : $[A] = A_{liq} - A_{gaz}$.

Pour prendre en compte les discontinuités, la méthode Ghost Fluid est utilisée [70]. Le principe consiste à prolonger par continuité la variable considérée au delà de l'interface, plutôt que de lui faire subir une brusque discontinuité, ce qui aurait pour effet de rendre les schémas numériques instables et/ou oscillants. Une illustration de la méthode est présentée en Figure 2.1. Le schéma numérique reste inchangé mais la condi-

tion de saut est directement intégrée dans les cellules "Ghost" de la variable étudiée (proche de l'interface). Les valeurs de A prolongées de part et d'autre de l'interface sont déterminées pour que l'application standard du schéma numérique revienne à la prise en compte directe de la discontinuité : Ainsi l'application du schéma standard sur le maillage d'origine en utilisant les valeurs ghost revient à la détermination de la position de l'interface avec l'application directe de la condition de saut. A noter que la résolution de l'équation de Poisson (Eq 2.7) présente une discontinuité, par conséquent la méthode Ghost Fluid est également employée pour la résolution du système (Voir [71, 60] pour plus de détails).

Si on prend l'exemple de la figure Figure 2.1 ,une configuration 1D, et que ou l'on souhaite calculer la condition de saut de la variable A à l'interface. Celle-ci dépend de la fonction Level Set φ et s'exprime telle que :

$$[A] = \frac{A(x_{i+2})|\varphi(x_{i+1})| + A(x_{i+1})|\varphi(x_{i+2})|}{|\varphi(x_{i+1})| + |\varphi(x_{i+2})|} \tag{2.12}$$

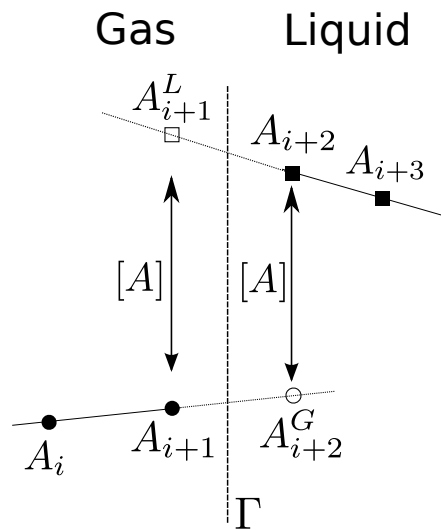


FIGURE 2.1 – Illustration de la méthode Ghost Fluid pour une variable A . ● : points dans le gaz, ■ : points dans le liquide. ○, □ : points ghost gaz et liquide respectivement. Γ représente l'interface liquide-gaz. (Thèse Benjamin Duret)

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

volumique $[\rho]$, viscosité $[\mu]$).

2.2.2 Approche Lagrangienne

Au contraire des approches avec suivi d'interface, les approches de spray dispersées ne cherchent pas à décrire précisément l'écoulement à l'échelle de l'interface. Un modèle est donc appliqué. Typiquement à l'échelle de l'interface le liquide est supposé être sous la forme d'une goutte sphérique sans écoulement interne. L'écoulement gazeux et les échanges autour de l'interface sont supposés correspondre au cas modèle d'une goutte isolée dans un écoulement gazeux. Cette approche permet différents niveaux de modélisation pouvant aussi s'appliquer à la représentation d'un spray qui peut être statique avec la détermination de la distribution de la taille, de la vitesse etc ... Pour cette description statistique qui peut être plus au moins raffinée, des approches Eulérienne ou Lagrangienne existent.

Les paragraphes suivants détailleront les équations utilisées dans l'approche lagrangienne [72, 73]. Notons que ces méthodes et ces équations étaient utilisées dans le code ASPHODEL [74, 75, 76, 77] et ont été migrées dans le code ARCHER par Zacharia Bouali.

Dans le registre des méthodes lagrangiennes appliquées à l'atomisation des jets liquides on trouve aussi les travaux de Gorokhovski [78] et Apte et al [79]. qui adoptent une démarche originale. L'approche lagrangienne n'est pas limitée au suivi des gouttes dans la zone de l'écoulement où l'on trouve effectivement des gouttes, elle est utilisée pour modéliser la phase liquide dès la sortie de l'injecteur. Le jet liquide est ainsi représenté sous la forme d'une injection successive de "grosses" gouttes dont le diamètre initial est celui de l'injecteur. L'atomisation primaire est alors vue comme une succession de fragmentations des gouttes mères et de leurs descendantes, résultant de l'effet de la turbulence de la phase gazeuse. Des modèles stochastiques basés sur l'analyse de Kolmogorov (Gorokhovski et Saveliev [80]) sont utilisés pour décrire la dynamique des fragmentations. Les fragmentations s'arrêtent lorsque la taille des gouttes atteint une valeur critique, conditionnée par l'équilibre entre le niveau de turbulence et la tension de surface. Ces méthodes proposent donc une description complète de l'atomisation des jets liquides turbulents, depuis l'injection jusqu'aux plus petites gouttes. Elles permettent de prédire correctement les propriétés globales de l'atomisation, en termes de longueur de coeur liquide et de tailles moyennes des gouttes. Cette descrip-

tion a néanmoins ses limites dans la mesure où elle néglige absolument tous les détails de la dynamique de l'interface (Gorokhovski et Herrmann [81]).

2.2.2.a Équation Lagrangienne

L'équation de conservation de la quantité de mouvement est une équation différentielle ordinaire de la forme :

$$m_l \frac{d\mathbf{V}_k}{dt} = \sum \mathbf{F}_k \quad (2.13)$$

\mathbf{F}_k est une force extérieure appliquée à la particule k , \mathbf{V}_k est la vitesse lagrangienne de la goutte liquide. Cette force extérieure peut être la force de traînée mais aussi la force de masse ajoutée, la force de portance, le poids. Dans le cas du transport d'un spray liquide, nous ne retiendrons que la force de traînée. On détermine alors la position et la vitesse d'une goutte grâce aux équations suivantes :

$$\frac{d\mathbf{V}_k}{dt} = \frac{1}{\beta_k} (u(\mathbf{X}_k, t) - \mathbf{V}_k) \quad (2.14)$$

$$\frac{d\mathbf{X}_k}{dt} = \mathbf{V}_k \quad (2.15)$$

\mathbf{X}_k est la position de la particule liquide et $u(\mathbf{X}_k, t)$ la vitesse de la phase gazeuse vue par la goutte à la position de la particule \mathbf{X}_k .

2.2.2.b Loi de traînée

La loi de traînée utilisée est celle de particule solide sphériques. La force de traînée s'exprime de la façon suivante :

$$\mathbf{F}_{traîne,k} = 3\pi a_k \mu \mathbf{C}_k (u(\mathbf{X}_k, t) - \mathbf{V}_k) \quad (2.16)$$

avec a_k le diamètre de la goutte liquide et le coefficient de traînée \mathbf{C}_k peut s'exprimer de la façon suivante [82] :

$$\mathbf{C}_k = 1 + \frac{\mathbf{Re}_k^{2/3}}{6} \quad (2.17)$$

Avec

$$\mathbf{Re}_k = \frac{a_k |\mathbf{V}_k - u(\mathbf{X}_k, t)|}{\nu_g} \quad (2.18)$$

Grâce aux équations 2.16, 2.18 et à l'expression de la masse d'un goutte sphérique $m_d = \pi \rho_k a_k^3 / 6$ on obtient la relation suivante :

$$\frac{d\mathbf{V}_k}{dt} = \frac{(u(\mathbf{X}_d, t) - \mathbf{V}_k)}{a_k^2} \frac{18\mu\mathbf{C}_k}{\rho_k} \quad (2.19)$$

Ce qui détermine directement le temps d'inertie de la particule k :

$$\beta_k = \frac{\rho_k a_k^2}{18\mu\mathbf{C}_k} \quad (2.20)$$

2.2.3 Forçage turbulent

Pour obtenir un écoulement représentatif des conditions d'injection dans une configuration simplifiée d'étude une méthode de forçage de la turbulence a été mise en oeuvre. Le but est d'obtenir un écoulement turbulent homogène isotrope (THI) liquide-gaz avec des corrélations réalistes entre la distribution du liquide et du champ de vitesse. Le domaine de calcul est un cube avec des conditions périodiques.

Pour cette configuration, la turbulence est entretenue par une méthode de forçage. Cela est possible grâce au terme source f dans l'équation (2.2), qui produit un forçage linéaire (initialement développé par Rosales et Meneveau en monophasique [83]).

Benjamin Duret [61] a étendu cette méthode de forçage pour la THI liquide-gaz. Le terme f peut être évalué tel que $f = Au'$ avec A le coefficient de forçage. On applique une décomposition de Reynolds au champ de vitesse $u = \bar{u} + u'$, le terme u' représente les fluctuations de vitesses et \bar{u} le champ de vitesse moyen.

Il est alors possible d'écrire l'équation d'évolution de l'énergie cinétique turbulente $k = \frac{1}{2}\overline{u'^2}$ comme :

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{u}_i k)}{\partial x_i} = C_k + 2Ak \quad (2.21)$$

Avec C_k regroupant les contributions énergétiques sans forçage typique dont principalement la dissipation de l'énergie cinétique et le transfert d'énergie avec l'interface. Ce terme contient une interface liquide-gaz, il est donc complexe d'estimer directement A à partir de l'équation (2.21). Par conséquent, la procédure suivante a été employée :

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

$$C_k^{n-1} = \frac{k^n - k^{n-1}}{\Delta t} - 2A^{n-1}k^{n-1} \quad (2.22)$$

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

$$2A^n k^n = \frac{k_c - k^n}{\tau_f} - C_k^{n-1} \quad (2.23)$$

Où k_c est le niveau d'énergie cinétique choisie au préalable, τ_f est un temps caractéristique de relaxation (dans notre cas on prendra $\tau_f = 3\Delta t$ afin d'éviter un forçage trop fort ou trop fréquemment pouvant déstabiliser le solveur). Par conséquent, le coefficient de forçage A est calculé à chaque pas de temps pour introduire le terme f dans les équations de Navier-Stokes (2.2). Cette méthode maintient une Turbulence Homogène Isotrope statistiquement stationnaire dans tout le domaine [61].

Cependant ce type de forçage possède quelques inconvénients : l'énergie est ajoutée à toutes les échelles de turbulence, contrairement au forçage spectral (utilisé fréquemment en monophasique) [84] où le terme de forçage est appliqué uniquement à une gamme choisie de nombres d'ondes. Mais l'application d'un forçage spectral en DNS diphasique est complexe à cause des discontinuités à travers l'interface, il est aussi plus coûteux en temps de calcul (utilisation d'un algorithme de transformée de Fourier rapide).

2.2.4 Configuration numérique

La configuration étudiée est une THI diphasique forcée dans un domaine 3D cubique. Les conditions limites sont périodiques sur toutes les frontières. Un schéma représentant la configuration est présentée en 2.2. La quantité initiale de liquide est définie par la fraction volumique de liquide ϕ , qu'il est possible de faire varier de 0 à 100%. Cela permet d'obtenir une gamme de gouttes plus variée.

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

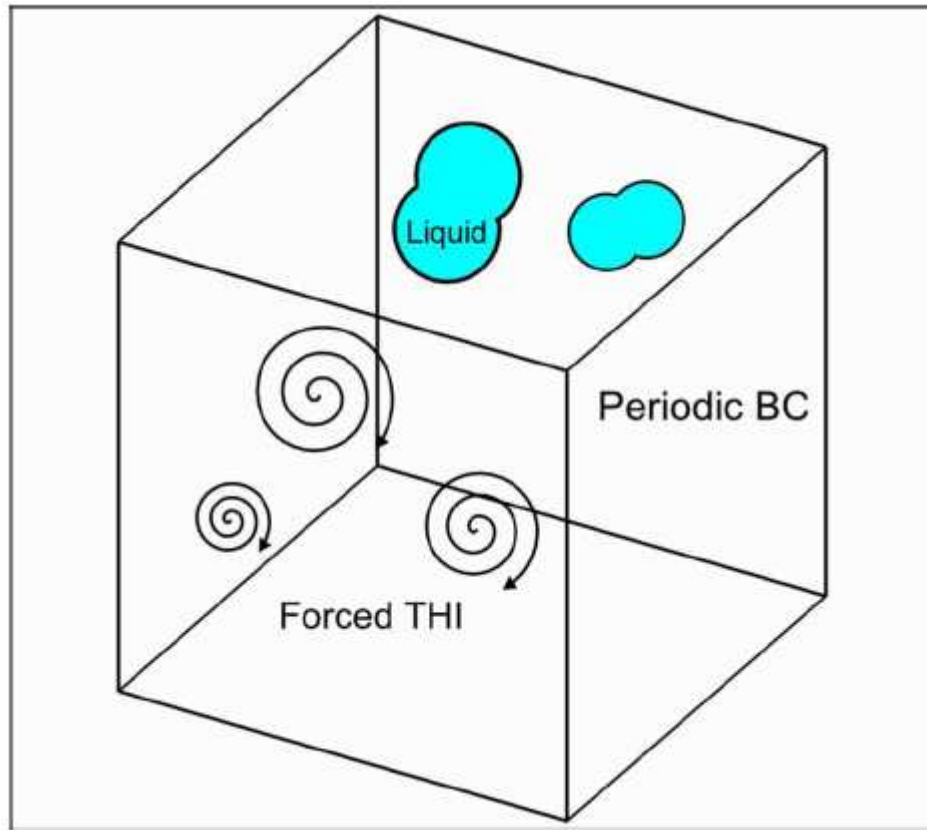


FIGURE 2.2 – Schéma représentant la configuration numérique étudiée (THID). (Thèse Benjamin Duret)

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

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

2.3 Transformation des structures liquides en particules lagrangiennes

Bien que très simplifiée, la configuration THID met en évidence des structures liquides très petites qui posent des problèmes de résolutions. En effet, les particules les plus petites, bien que rares, sont représentées que sur quelques mailles. Si on les as-

simile à des gouttes, certaines ont un diamètre de moins d'une dizaine de mailles. Ce problème est crucial pour réaliser des simulations complètes de l'injection dans le cadre d'application. En effet le rapport d'échelles entre les plus petites gouttes et la taille du système d'injection ne permet pas de garantir une résolution suffisante. Pour faire face à ce problème il est possible d'augmenter la taille du maillage en utilisant au maximum la capacité des ordinateurs les plus puissants. Même de cette façon, beaucoup d'applications ne peuvent être abordées. Une autre stratégie consiste à utiliser les techniques de raffinement de maillage adaptatif. Complexes cette technique ne donne des gains significatifs que si, seule une partie du domaine de calcul est concernée. Dans le cas d'un spray formé c'est l'ensemble du domaine qui est concerné. Il faut alors se tourner vers la modélisation, par exemple en remplaçant des parties de l'écoulement sous-résolues par un modèle simplifié basé sur le suivi d'une goutte de façon Lagrangienne. Nous utiliserons ici une configuration académique THID pour étudier la transformation d'une approche résolue en un suivi de particules lagrangiennes et les conséquences sur l'écoulement

2.3.1 Introduction

Dans cette partie le couplage Euler \rightarrow Lagrange est expliqué. Le principe est de transformer les petites structures liquides en particules lagrangiennes. Ce modèle de transformation pose plusieurs questions.

Est-il gênant d'enlever des informations du champ eulérien ? Par définition oui, les équations eulériennes sont elliptiques, cela signifie que modifier une partie du champ peut impacter l'ensemble du champ. En pratique la suppression d'une ou de plusieurs gouttelettes n'influence pas le reste du domaine.

Quelles gouttelettes doit on transformer ? Sachant que les gouttelettes seront transformées en particules lagrangiennes sphériques, il est préférable que les gouttelettes soit elles mêmes quasi sphériques. De plus ces gouttelettes doivent avoir une taille limitée puisque les particules lagrangiennes doivent en théorie avoir une taille inférieure à la maille. Des critères de transformation, détaillés dans la section 2.3.3, ont été mis en place au cours de ce travail de thèse afin de transformer uniquement les gouttelettes voulues.

Cette transformation va t-elle avoir une influence sur la masse, la quantité de mouvement ou l'énergie cinétique ? Des statistiques calculant la valeur de ces différentes grandeurs physiques "avant/après" transformation ont été réalisées dans la partie 2.4.

Un exemple de transformation peut être observé sur les figures 2.3 et 2.4 sur 3 gouttes, la configuration étant celle détaillée dans la partie 2.2.4 à savoir une THI avec

5% de liquide . La première figure est le résultat de la simulation sans transformation. L'algorithme de transformation est alors appliqué sur la simulation et le résultat est la figure 2.4. Trois particules lagrangiennes sont apparues, en rouge, et on remplace les petites structures eulériennes.

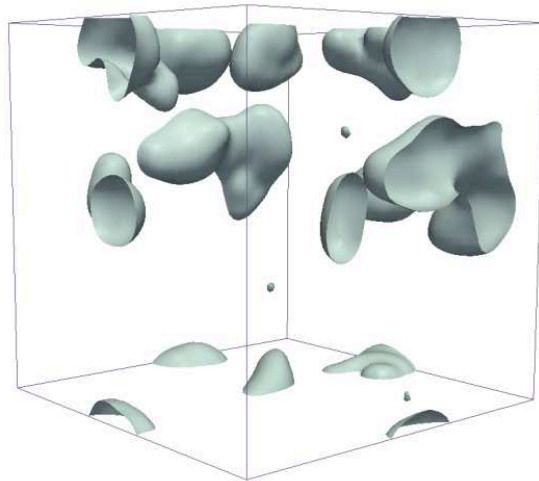


FIGURE 2.3 – Visualisation de l'interface liquide gaz dans une thi à 5%

L'algorithme de transformation des gouttes eulériennes en particules lagrangiennes peut être décomposé en plusieurs étapes qui sont :

- Sélection des gouttes à transformer
- Création des particules lagrangiennes équivalentes
- Destruction des gouttes eulériennes transformées

Il est nécessaire de détecter dans un premier temps les structures liquides puis de définir des critères de transition entre les approches lagrangiennes et eulériennes. Une fois ce critère de transition posé, on définit l'ensemble des structures liquides qui seront transformées en particules lagrangiennes. Les gouttes lagrangiennes doivent être initialisées en respectant les données physiques calculées dans la partie eulérienne. Ainsi plusieurs caractéristiques des gouttes lagrangiennes sont extraites de la zone de calcul eulérienne. Ces données sont :

- le diamètre des gouttes
- la position initiale des gouttes

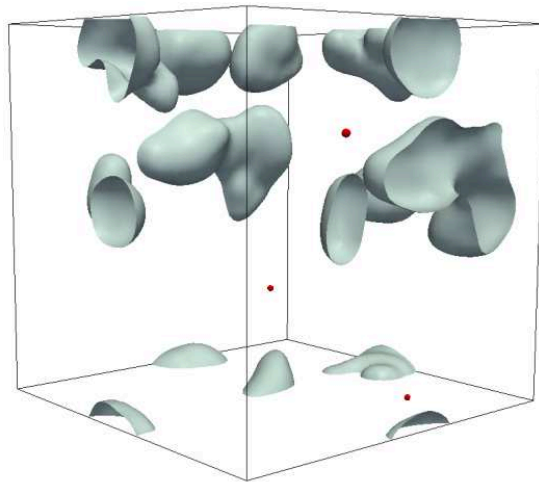


FIGURE 2.4 – Visualisation de l'interface liquide gaz dans une thi à 5% avec des particules lagrangiennes (rouges)

- la vitesse des gouttes

Il est à noter que dans les calculs réalisés, le couplage inverse lagrangien \rightarrow eulérien n'avait pas encore été réalisé. La coalescence entre les particules et les structures ne peut donc pas avoir lieu. Pour réaliser le couplage inverse il faut retransformer les particules lagrangiennes en structures liquides juste avant que la collision n'ait lieu. Chaque particule lagrangienne devra stocker sa distance minimale à l'interface donnée par la fonction LevelSet φ . Lorsque cette distance devient équivalente au rayon de la particule, la structure liquide doit être reconstruite. La re-évaluation de la LevelSet peut se faire avec :

$$\varphi(x) = \max(\varphi(x), R_k - \|x - x_k\|) \tag{2.24}$$

Le transfert de la quantité de mouvement de la goutte est plus compliqué. Le modèle le plus simple est de supposer que la goutte sphérique a un mouvement solide identique à celui de son centre de gravité puis de faire :

$$u(x) = V_k \forall \|x - x_k\| \leq R_k \tag{2.25}$$

2.3.2 Labélisation des structures liquides

Afin de transformer certaines structures liquides en particules lagrangiennes, il est nécessaire d'identifier chaque structure liquide et leur domaine Ω_k . Le domaine Ω_k représente l'ensemble des cellules composant la structure liquide k .

L'identification des structures liquides a été réalisée par un algorithme de labélisation : cela consiste à marquer chaque structure liquide par un numéro. L'algorithme fonctionne de la manière suivante : il cherche une cellule contenant du liquide, il la marque avec un numéro k . L'algorithme cherche ensuite les cellules voisines contenant elles aussi du liquide. S'il en trouve, il les marque avec le numéro k . Cette opération de recherche de voisin sera effectuée tant que des cellules voisines contiendront du liquide. Le domaine Ω_k sera l'ensemble des cellules marquées avec le numéro k . La figure 2.5 contient l'algorithme de labélisation alors que la figure 2.6 illustre l'utilisation de l'algorithme étape par étape. La première étape sur la figure 2.6 est de détecter une cellule contenant du liquide, de la labéliser avec le numéro et de tagger avec S toutes les cellules voisines contenant du liquide. Dans la seconde étape nous parcourons toutes les cellules voisines contenant du liquide. Dans la seconde étape nous parcourons toutes les cellules voisines qui sont labélisées elles aussi avec le numéro et nous continuons la recherche de cellules voisines contenant du liquide. Cette étape est répétée tant que des cellules voisines contiennent du liquide. Une fois que les cellules labélisées avec le numéro n'ont plus de cellules voisines contenant du liquide, nous cherchons une nouvelle cellule contenant du liquide. Et l'opération de parcours des voisins et de labélisation recommence mais cette fois avec le numéro 2. Enfin la figure 2.7 représente le résultat de cet algorithme sur une THI. Les structures liquides sont coloriées par leur identifiant sur la figure de droite alors que sur la figure de gauche le domaine Ω_k de chaque structure liquide est représenté.

Notons que l'algorithme n'est pas parallélisé, celui-ci agira indépendamment sur chaque processeur. Donc une particule dont le domaine Ω_k est sur plusieurs processeurs aura un sera sous domaine pour chaque processeur. Sur chaque sous domaine la structure liquide aura un identifiant différent, il ne sera donc pas possible de reconstruire le domaine Ω_k et d'identifier la structure liquide. Notons cependant que depuis la fin de mes travaux sur cette partie G. Vaudor a paralléliser cette algorithme.

Enfin le calcul des caractéristiques liées à la conservation des différentes grandeurs physiques sur chaque structure liquide sera réalisé sur les domaines Ω_k et non sur le domaine global.

```

1: set  $id=1$ 
2: for  $i = 1, N_c$  do
3:   if  $\phi(i) > 0$  and cell untagged then
4:     tag cell with  $id$  and mark as  $S$ 
5:     While any cell are marked as  $S$  do
6:       tag all untagged  $\phi > 0$  neighbors with  $id$  and mark as  $S$ 
7:       unmark  $S$  cell
8:     end while
9:     set  $id = id+1$ 
10:  end if
11: end for

```

FIGURE 2.5 – Algorithme de labélisation des structures liquides

2.3.3 Critère de transition

Des critères de transitions ont été proposés notamment par Herrmann [8, 85]. L'auteur propose de transformer des petites structures liquides quasi sphériques en particules lagrangiennes. Ceci revient à définir deux critères de transition, un volume de référence et une excentricité. Le premier critère représente la taille de la structure liquide alors que le deuxième représente sa forme. Nous retenons dans ce travail les mêmes critères. Deux valeurs de références ont été fixées pour le volume et l'excentricité. Une particule lagrangienne est créée si une structure liquide a un volume inférieur à notre volume de référence V_{ref} et si l'excentricité est inférieure à l'excentricité de référence e_{ref} .

Le volume de référence doit être fixé en fonction de la résolution du maillage. De plus un volume de référence équivaut à fixer un rayon de référence puisque notre particule est supposée sphérique. Notre critère de taille correspond donc à imposer un rayon proportionnel à la taille de maille dx .

$$R_{ref} = \sqrt[3]{\frac{3V_{ref}}{4\pi}} \quad (2.26)$$

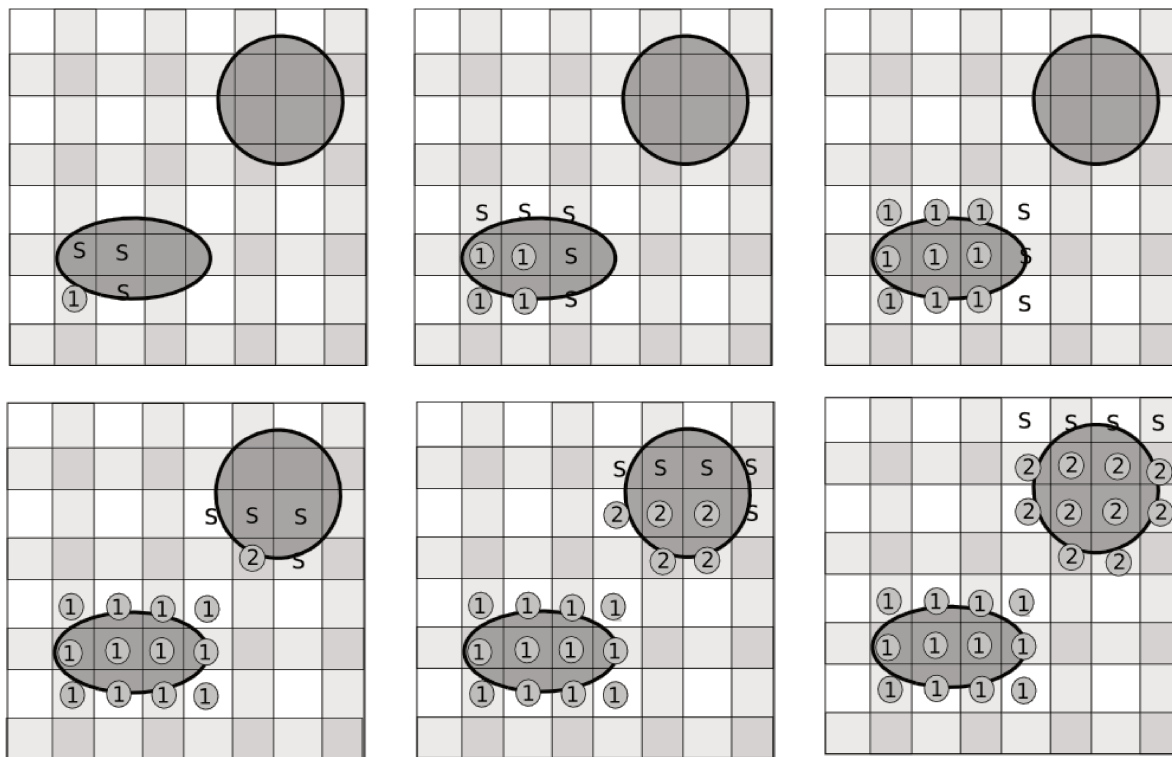


FIGURE 2.6 – Exemple d’action de l’algorithme de labélisation (du haut gauche vers bas à droite)

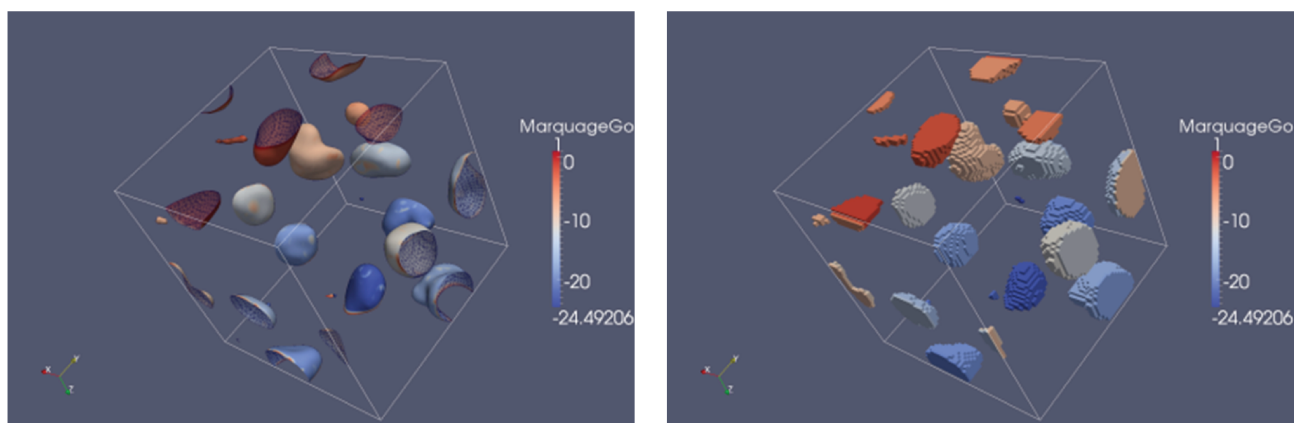


FIGURE 2.7 – Algorithme de labélisation des structures liquides

Notre critère de forme, l'excentricité est le rapport entre le rayon théorique de la structure liquide et le maximum de la fonction distance dans la structure liquide. Il est calculé de la manière suivante :

$$\mathbf{e}_k = \frac{R_k}{\max(\varphi_k)} \quad R_k = \sqrt[3]{\frac{3V_l}{4\pi}} \tag{2.27}$$

Où R_k est le rayon de la goutte et $\max(\varphi_k)$ est le maximum de la fonction distance sur Ω_k .

$\max(\varphi_k)$ peut être n'importe où dans le domaine Ω_k comme l'illustre la figure 2.8.

Dans une goutte parfaite sphérique l'excentricité aurait pour valeur 1, et plus la goutte est déformée plus la valeur de l'excentricité e_k sera importante.

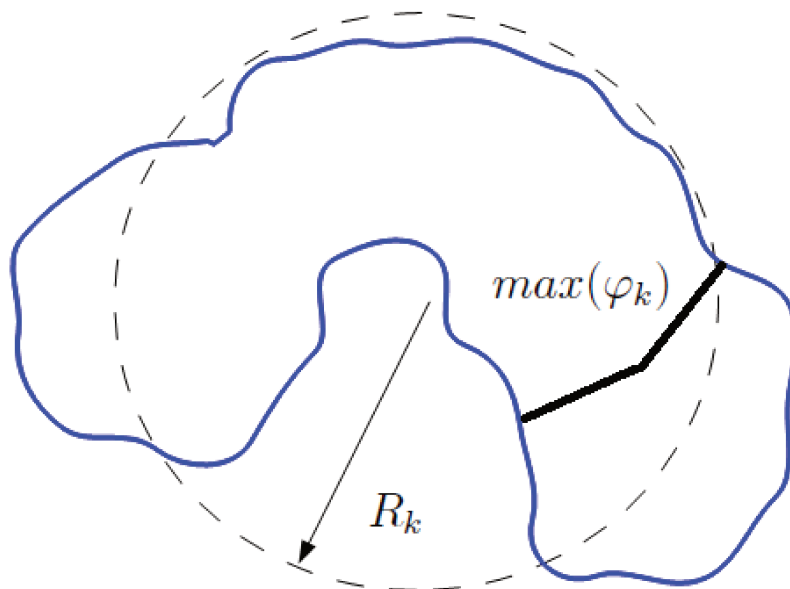


FIGURE 2.8 – Exemple du maximum de la fonction distance d’une structure liquide (bleu) et du rayon équivalent de la représentation lagrangienne (pointillés)

2.3.4 Transition entre le calcul eulérien et le calcul lagrangien

Les gouttes lagrangiennes doivent être initialisées en respectant les données physiques calculées dans la partie eulérienne. Ainsi plusieurs caractéristiques des gouttes lagrangiennes sont extraites de la zone de calcul eulérien. Ces données sont :

- le diamètre des gouttes
- la position initiales des gouttes
- la vitesse des gouttes

2.3.4.a Diamètre des particules

Afin de quantifier les transferts de masse, quantité de mouvement et énergie lors du transport lagrangien, il faut fixer le diamètre des particules. Les gouttes sont supposées sphériques au moment de la transition. Le calcul du diamètre est directement obtenu en fonction du volume de la particule qui est calculé via :

$$\mathbf{V}_l = \int_{\Omega_k} d\mathbf{x} \quad (2.28)$$

Le diamètre équivaut donc à :

$$\mathbf{a}_k = \left(\frac{6\mathbf{V}_l}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}} = 2\mathbf{R}_k \quad (2.29)$$

2.3.4.b Position des particules

Afin d'initialiser le calcul lagrangien, il est nécessaire de spécifier la position initiale des particules. La position des particules lagrangiennes équivaudra à la position du centre de masse de chaque structure liquide équivalente. La position est déterminée par la relation suivante :

$$\mathbf{x}_k = \frac{1}{\mathbf{V}_l} \int_{\Omega_k} \mathbf{x} d\mathbf{x} \quad (2.30)$$

2.3.4.c Vitesse des particules

Les équations eulériennes de conservation de la quantité de mouvement concernent la vitesse de mélange. Dans le cas de l'initialisation des particules lagrangiennes, il faut retrouver la vitesse de liquide. Ceci est réalisé en utilisant la relation suivante :

$$\mathbf{V}_k = \frac{1}{\mathbf{V}_l} \int_{\Omega_k} u(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (2.31)$$

Cette vitesse correspond à la vitesse moyenne de liquide sur l'ensemble du domaine Ω_k . Comme la vitesse de la particule est égale à sa vitesse moyenne, l'énergie cinétique turbulente de la particule est donc nulle. Une fluctuation de vitesse peut être donnée

à la particule en utilisant l'énergie cinétique turbulente mais dans ce cas, la quantité de mouvement de la goutte n'est plus conservée. Ou bien, il faudrait que la particule transporte une variable supplémentaire qui serait sa turbulence interne.

2.3.5 Destruction des structures liquides transformées

Une fois la particule lagrangienne créée, il faut supprimer sa représentation eulérienne. Sur le domaine Ω_k la fraction volumique doit être remise à zéro et la LevelSet doit être inversée. Ceci suffit à faire disparaître la structure liquide du champ eulérien. Le fait que la fonction distance ne soit plus exacte sur le domaine Ω_k suite à notre opération d'inversion n'est pas dérangeant. En effet la LevelSet sera mise à jour via la fraction volumique et via l'opération de redistanciation.

2.3.6 Analyse des critères de transformations

Dans cette partie les critères de transformation sont analysés. Les valeurs de référence des critères seront établies et on vérifiera que les gouttes que l'on souhaite transformer correspondent bien à celles ciblées par nos critères de transformation.

Pour cela nous allons dans un premier temps étudier le rapport entre nos deux critères, à savoir taille de la goutte et son excentricité. Physiquement les petites structures doivent être sphériques alors que les plus grosses structures peuvent avoir des formes plus diverses. En effet le nombre de Weber de la goutte diminue avec la taille de celle-ci, ce qui correspond à des gouttes plus stables et donc moins déformées. Ainsi si nous traçons le rapport entre le diamètre et l'excentricité nous devrions avoir une excentricité très faible pour les petits diamètres. Si on réalise des simulations et que l'on trace le rapport entre nos deux critères pour chaque structure détectée nous obtenons le résultat présenté la figure 2.9. On s'aperçoit que les résultats ne sont pas du tout ceux escomptés, puisque les petites structures ont des excentricités très variables alors que les plus grosses structures ont des excentricités proche de 1. Notons que nous nous sommes limités à des structures de taille maximum égale à $15\Delta x$

Pourquoi existe t-il une telle différence ? Une partie de la réponse vient du fait que le critère d'excentricité n'est pas idéal. Si on regarde plus en détail le calcul de ce critère, on remarque qu'une erreur importante peut être commise. Imaginons que nous ayons la configuration présentée par la figure 2.10, la structure liquide sphérique en bleu (alors que le gaz est en blanc). Le quadrillage représente le maillage, la fonction distance (S) est calculée au centre de chaque cellule. Lors du calcul de l'excentricité de la structure, une des 4 valeurs de la fonction distance va être utilisée (les 4 sont iden-

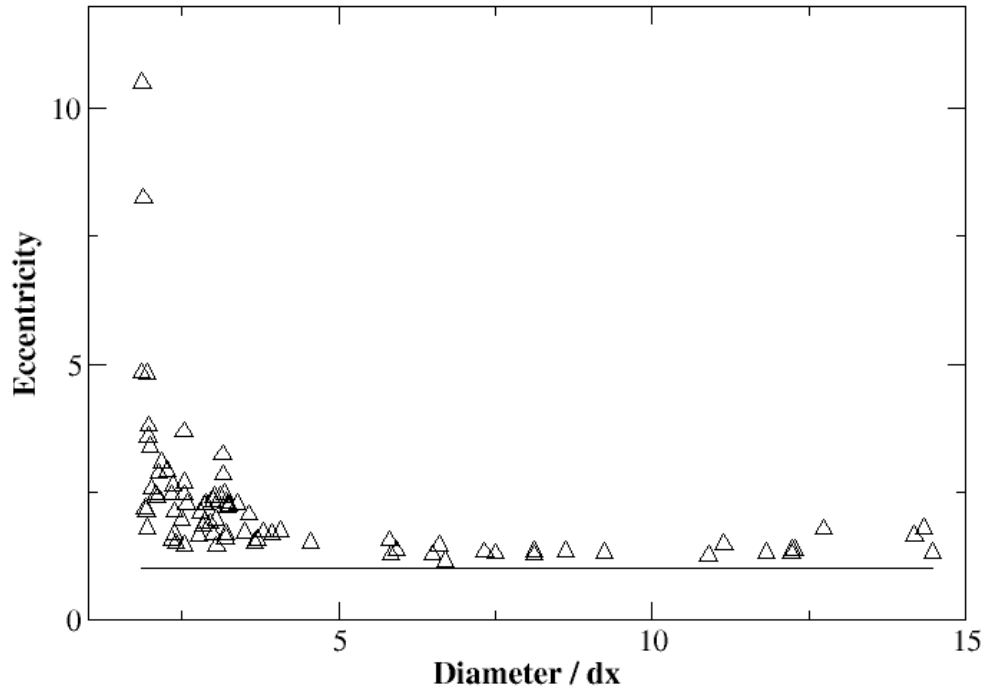


FIGURE 2.9 – Mesure de l'excentricité en fonction du diamètre des particules

tiques). Or aucune de ces valeurs ne correspond à la distance maximale théorique S_{max} de la goutte qui est au centre de gravité de la structure. Une erreur est donc commise sur la fonction distance $S = S_{max} - \frac{\sqrt{2}}{2}dx$ se répercutant ainsi sur le calcul de l'excentricité :

$$e = \frac{R}{S} = \frac{R}{S_{max} - \frac{\sqrt{2}}{2}dx} = \frac{1}{1 - \frac{\sqrt{2}}{2R}dx} \neq 1 \quad (2.32)$$

L'excentricité de notre structure liquide parfaitement sphérique devrait valoir un, or ce n'est pas la cas. La valeur obtenue est inversement proportionnelle à la taille de la goutte : plus la structure liquide sera petite plus l'erreur numérique pourra être importante. Cette erreur explique les très fortes valeurs d'excentricités que l'on trouve pour les petites gouttes.

La question de la pertinence du critère de forme est donc importante. Est il pos-

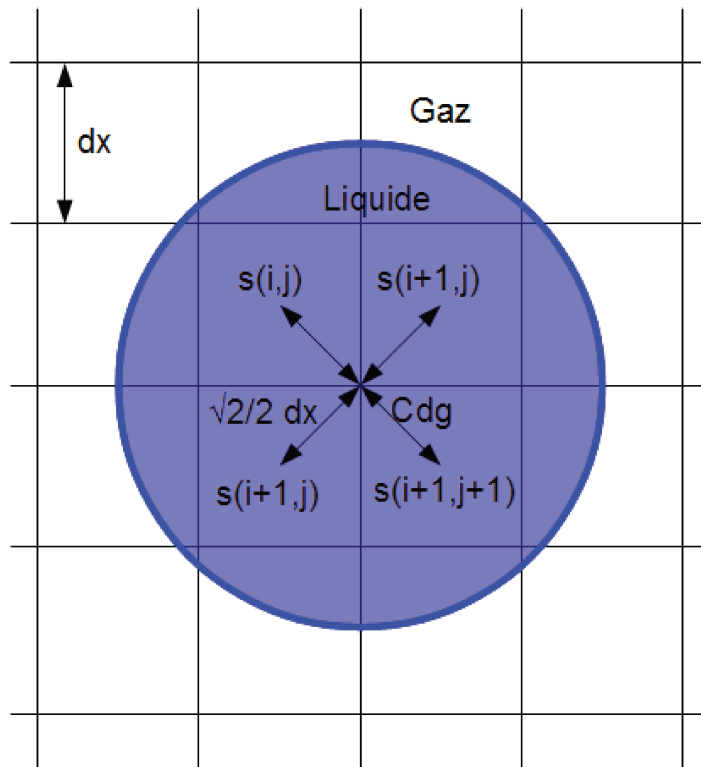


FIGURE 2.10 – Problème de mesure sur de l'excentricité dans la cas d'une goutte sphérique

sible de trouver un meilleur critère que l'excentricité? Les échanges liquide gaz ont lieu au niveau de la surface, il est donc important que la quantité surfacique reste équivalente avant et après transformation. Même si nos simulations ne contiennent pas d'échanges liquides gaz, on peut donc se demander si la quantité surfacique ne ferait pas un bon critère de forme. Pour ce faire nous avons tracé l'erreur surfacique relative $Erreur\ Sur\ facique = \frac{Surface_{Eul} - Surface_{Lag}}{Surface_{Eul}}$ en fonction de l'excentricité figure 2.11. La surface Eulerienne est calculé via l'aire des plans formant l'interface. Ce calcul est approché puisque l'interface peut être discontinue par morceaux (entre les différentes mailles de calcul) et ne prend notamment pas en compte la courbure de l'interface. Les symboles ronds représentent les gouttes ayant un diamètre inférieur à $5\Delta x$, alors les symboles triangles représentent les gouttes ayant un diamètre supérieur à $5\Delta x$. Plus une goutte est déformée (et donc plus son excentricité est importante) plus l'erreur sur la surface doit être importante et vice versa. Or sur la figure 2.11 nous observons un nuage de points et pas de lien direct entre la surface et l'excentricité. Les deux critères ne représentent pas la même chose.

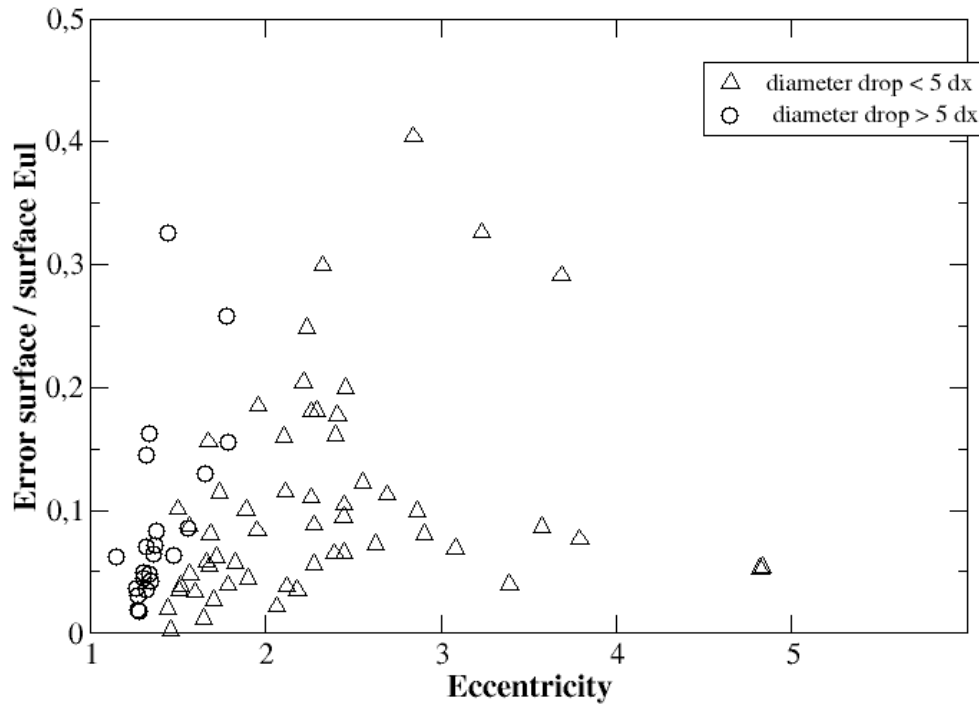


FIGURE 2.11 – Mesure de l'excentricité en fonction de la surface des particules

Si on pose maintenant comme critère de forme l'erreur surfacique relative et que nous effectuons une comparaison entre nos deux critères. On trace l'erreur surfacique relative en fonction du diamètre des structures liquides figure 2.12. Le nuage de points formé par le tracé est beaucoup plus dispersé que celui observé figure 2.9. Ce critère semble plus sensible pour représenter les sphéricité des gouttes. Cependant la procédure approchée de calcul de surface Eulerien reste sensible aux erreurs pour les faibles résolutions $R_{goutte} < 5\Delta x$. Nous utiliserons le critère d'erreur surfacique comme critère de forme pour la suite de cette étude.

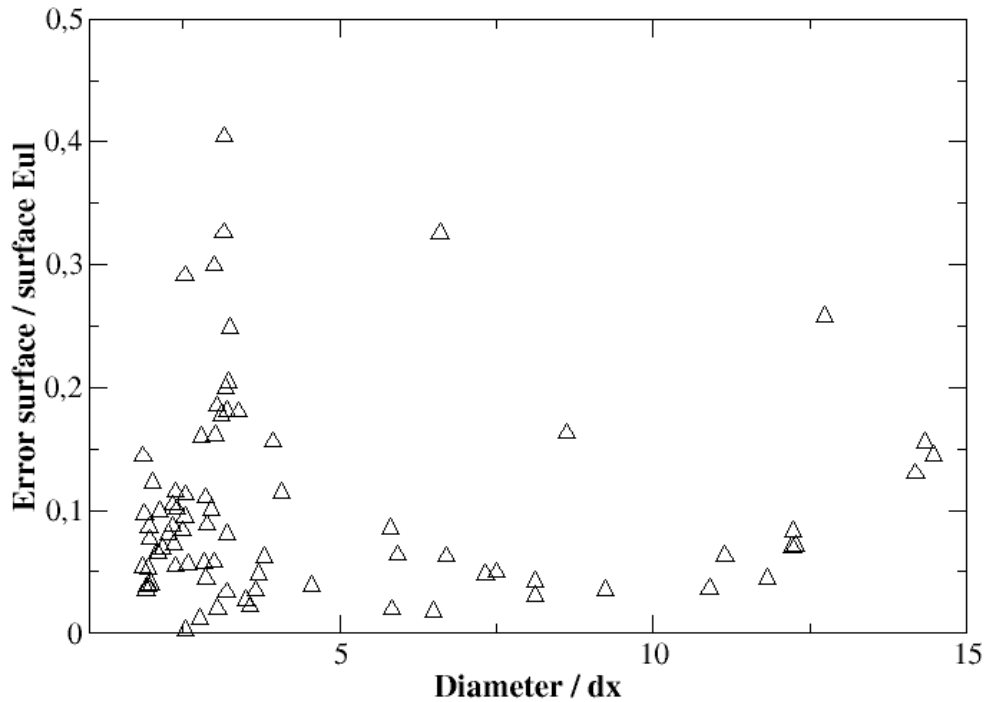


FIGURE 2.12 – Mesure de la surface en fonction du diamètre des particules

2.4 Analyse de l'influence de la transformation sur différentes grandeurs physiques

Dans cette partie, l'influence de la transformation sur différentes grandeurs physiques, qui sont les évolutions de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie cinétique turbulente, sera étudiée avant et après transformation. L'étude des différentes grandeurs se fera localement, c'est à dire sur l'ensemble des cellules contenant une structure liquide identifiée pour subir la transformation.

2.4.1 Évolution de la masse

Dans cette partie l'évolution de la masse de liquide et gaz durant la transformation est étudiée. La figure 2.13 représente le changement de masse de liquide et gaz pour

2.4 Analyse de l'influence de la transformation sur différentes grandeurs physiques 69

une série de goutte. Si la masse est parfaitement conservée alors le ratio masse lagrangienne sur masse eulérienne sera de un, on peut remarquer que c' est le cas pour la masse liquide. Ceci était évidemment attendu puisque le diamètre de la goutte était défini dans la section 2.3.4.a afin d'obtenir cette égalité. En revanche la masse du gaz n'est pas conservée, une erreur est donc créée et cette erreur est directement proportionnelle à la taille de la goutte transformée. Les équations des différents états sont données par :

	Euler	Lagrange
Liquide	$m_l = \iiint \rho_l \phi_l dx$	$m_l = \frac{4}{3} \rho_l \Pi R^3$
Gaz	$m_g = \iiint \rho_g (1 - \phi_l) dx$	$m_g = \iiint \rho_g dx$

La non conservation de la masse du gaz est due au fait que le domaine du gaz n'est pas le même dans la représentation eulérienne ou lagrangienne. Lorsqu'une goutte est transformée, celle ci est supprimée du champ eulérien. Cette suppression va directement créer du gaz à l'endroit où se trouvait le liquide.

2.4.2 Évolution de la quantité de mouvement

Dans cette partie l'évolution de la quantité de mouvement de liquide et du gaz durant la transformation sera étudiée. La figure 2.14 a été réalisée : elle représente le changement de la quantité de mouvement du liquide et du gaz pour une série de gouttes. Tout comme pour la masse, la quantité de mouvement est parfaitement conservée si le ratio entre la quantité de mouvement de la partie lagrangienne sur la quantité de mouvement de la partie eulérienne vaut un. Par construction la vitesse de la particule lagrangienne a été définie de telle façon que la quantité de mouvement du liquide de la particule lagrangienne soit la même que celle de la goutte eulérienne. Le ratio pour le liquide vaut bien 1 comme attendu. Tout comme pour la masse, la quantité de mouvement du gaz n'est pas conservée. Si on écrit les équations des différents états :

	Euler	Lagrange
Liquide	$m_l \vec{u}_l = \iiint \rho_l \vec{u}(x) \phi_l dx$	$m_l \vec{u}_l = \frac{4}{3} \rho_l \Pi R^3 V_{moy}$
Gaz	$m_g \vec{u}_g = \iiint \rho_g \vec{u}(x) (1 - \phi_l) dx$	$m_g \vec{u}_g = \iiint \rho_g \vec{u}(x) dx$

Cette non conservation de la quantité de mouvement du gaz est due à deux raisons :

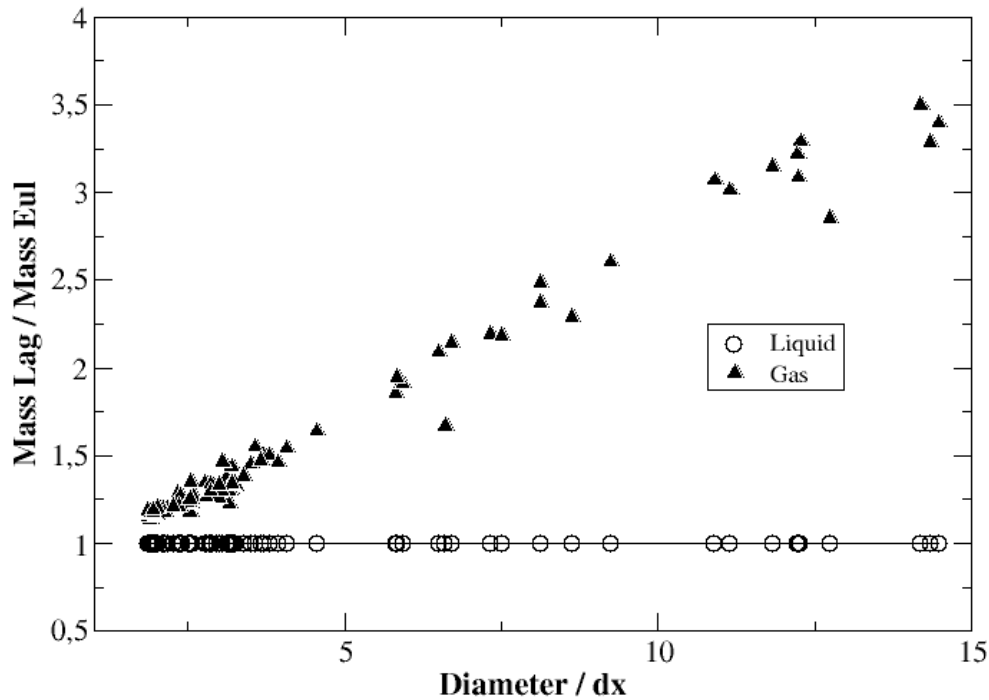


FIGURE 2.13 – Ratio de la masse Lag/Eul en fonction du diamètre des particules

- Comme pour la masse, le domaine de gaz n'est plus le même avant et après transformation.
- La vitesse du gaz à l'endroit où se trouvait le liquide est extrapolée ce qui entraîne une erreur. Ici la vitesse retenue pour un point devenu gazeux est la vitesse simplement prise comme l'ancienne vitesse du liquide avant transformation.

2.4.3 Évolution de l'énergie cinétique turbulente

Dans cette partie l'évolution de l'énergie cinétique turbulente du gaz et du liquide sera étudiée. La figure 2.15 représente le changement de l'énergie cinétique turbulente du liquide et du gaz pour une série de gouttes. Si le ratio énergie cinétique turbulente lagrangienne sur énergie cinétique turbulente eulérienne égale un, il y a parfaite

2.4 Analyse de l'influence de la transformation sur différentes grandeurs physiques 71

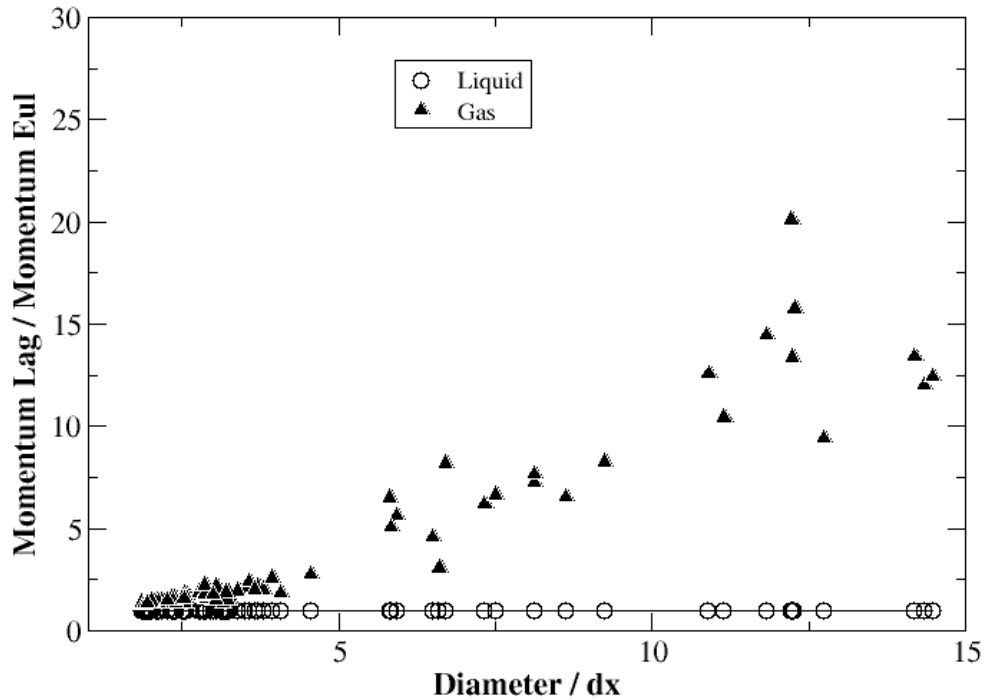


FIGURE 2.14 – Ratio de la quantité de mouvement Lag/Eul en fonction du diamètre des particules

conservation. Or, ni le gaz ni le liquide sont conservés. Les équations déterminant ces différentes énergies cinétiques sont :

	Euler	Lagrange
Liquide	$m_l k_l = \iiint \frac{1}{2} (\vec{u}(x) - \vec{u}_l)^2 \phi_l dx$	$m_l k_l = 0$
Gaz	$m_g k_g = \iiint \frac{1}{2} (\vec{u}(x) - \vec{u}_g)^2 (1 - \phi_l) dx$	$m_g k_g = \iiint \frac{1}{2} (\vec{u}(x) - \vec{u}_g)^2 dx$

L'énergie cinétique turbulente de liquide devient nulle lorsqu'une goutte est transformée. Cela crée une dissipation de l'énergie... La non conservation de l'énergie cinétique du gaz est elle due au fait que le domaine du gaz change lors de transformation, cela génère une erreur et celle ci est amplifiée par la modification de la vitesse moyenne

et rend imprévisible toute prédiction sur cette erreur. Une possibilité pour minimiser cette erreur serait de modifier la vitesse du gaz à l'endroit où se trouvait le liquide en le remplaçant par la vitesse moyenne du gaz.

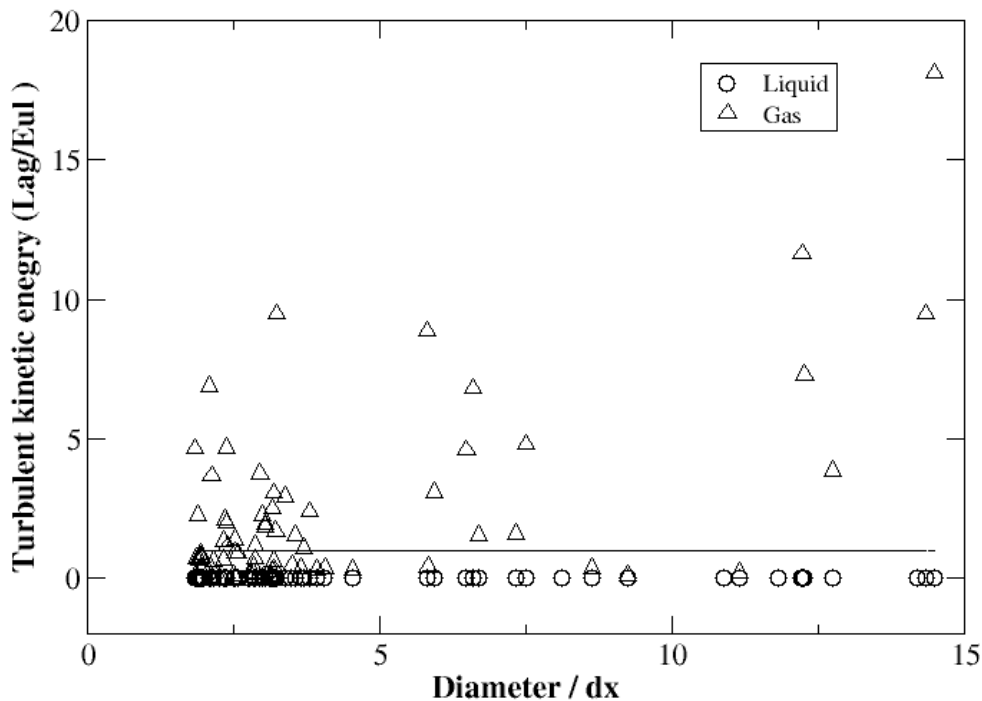


FIGURE 2.15 – Ratio de l'énergie cinétique turbulente Lag/Eul en fonction du diamètre des particules

2.5 Conclusion et perspectives

Nous avons montré que réaliser un couplage Euler Lagrange est difficile à mettre en œuvre. Tout d'abord, la question des critères de transitions nécessaires n'a pas de réponse immédiate. Ensuite nous avons réalisé la difficulté de limiter les erreurs (liées au gaz) créées lors de la transformation. Enfin la transformation est une source de dissipation de l'énergie cinétique turbulente du liquide.

Il est évident qu'il reste beaucoup de travail pour analyser finement les influences du couplage au cours du temps, et répondre à la question des critères de transition. Une solution pour améliorer fortement les résultats du couplage serait de d'utiliser un code ayant une méthode AMR (Adaptive Mesh Refinement). Cela permettrait d'avoir un grossissement de la maille contenant la particule lagrangienne et ainsi de respecter le modèle lagrangien (la particule doit avoir un diamètre inférieur à la taille maille). La méthode AMR servirait donc à déraffiner le maillage. Rajouter le couplage augmente de manière non négligeable le temps de calcul et le déraffinement de certaines zones permettrait d'améliorer le temps CPU. Les objectifs prioritaires de cette thèse n'étant pas de réaliser une AMR, nous n'avons pas exploré cette voie.

Ce couplage présente, donc des avantages évidents mais aussi des défauts non négligeables. Face à ces difficultés mais toujours dans l'optique de réduire le coût numérique de nos simulations, nous nous sommes donc intéressés à une autre possibilité, à savoir réaliser des simulations utilisant le formalisme LES Eulerien/Eulerien. Celles-ci permettent de résoudre uniquement les grandes échelles et donc d'avoir une taille de maille plus grande impliquant une réduction du coût CPU. Mais dans ce cas la phase dispersée de sous maille sera décrite de manière Eulerienne, éliminant ainsi le problème du couplage Euler/Lagrange. Dans le chapitre suivant nous intéresserons aux principes de base de la LES et à la résolution du système numérique imposé par ce formalisme.

Chapitre 3

Développement d'un modèle LES pour l'atomisation

Ce chapitre est dédié au développement d'un modèle de simulation aux grandes échelles pour l'atomisation. Dans un premier temps nous expliciterons les problèmes liés à un tel formalisme, puis nous présenterons le point de départ de notre développement à savoir le solveur interFoam du code OpenFOAM. Une attention particulière sera portée sur la méthode de suivi d'interface employée.

Dans un second temps nous expliciterons la méthode développée, capable, d'une part, de bien décrire l'interface liquide/gaz lorsque celle-ci est bien résolue par le maillage, d'autre part de passer à une vision du spray de sous mailles lorsque les échelles des structures ne permettent plus une résolution explicite de celles-ci. Nous détaillerons le système d'équations à résoudre et plus particulièrement l'équation de transport de la fraction volumique de liquide. Pour réaliser ces changements de formalisme, il faut être capable de définir des zones résolues et les zones de sous-mailles. Différents critères ont donc été proposés pour la première fois au cours de cette thèse.

Enfin, nous présenterons un nouveau couplage Eulérien/Lagrangien. Les particules lagrangiennes ne représentent pas réellement des structures liquides mais elles servent à transporter une information (ici la vitesse de liquide) afin de corriger les champs eulériens lorsque la fraction volumique de liquide devient trop faible.

3.1 Simulation diphasique aux grandes échelles

La simulation aux grandes échelles peut aussi être mentionnée par l'acronyme anglais "LES" (*large eddy simulation*), ces deux termes sont équivalents et le terme LES est devenu d'un usage courant même en français. Il sera souvent utilisé dans la suite du manuscrit. De la même manière le terme SGS (*subgrid scales*) sera parfois utilisé pour désigner les contributions de sous mailles. Dans un premier temps nous introduirons les principes de ce formalisme, puis nous discuterons de son intérêt dans le cadre de l'atomisation.

Au préalable nous énoncerons les équations régissant un écoulement diphasique. Le formalisme monofluide sera utilisé, celui ci permettant de condenser le système d'équations. En effet, au lieu d'avoir une équation de transport pour chaque phase, une seule équation de transport sera utilisée et celle ci permettra de décrire les deux phases simultanément. Pour l'établissement du formalisme monofluide, on se référera aux travaux d'Ishil [86] et Kataoka [87]

Ensuite nous présenterons les différents termes de sous mailles apparaissant suite au filtrage du système d'équations diphasiques. Enfin, nous expliquerons les problématiques dues à la modélisation de ces termes.

3.1.1 Généralités sur la simulation aux grandes échelles

Les premiers travaux concernant la LES, datent des années 1970 avec les travaux de J. Smagorinsky [88]. Initialement ces travaux étaient destinés aux simulations atmosphériques. Puis ce formalisme a connu de nombreuses évolutions et améliorations afin de l'étendre à différents types d'écoulement. La simulation aux grandes échelles est basée sur l'hypothèse de la cascade d'énergie de A. Kolmogorov [89]. Elle admet que la production d'énergie est contrôlée par les grandes structures de l'écoulement alors que la dissipation est réalisée principalement par les petites structures. Cette hypothèse est réalisée quel que soit le type d'écoulement pourvu que le nombre de Reynolds soit assez grand pour avoir une répartition d'échelle suffisamment importante entre les grandes et les petites échelles. D'un point de vue spectral, cela équivaut à dire que les basses fréquences contiennent l'énergie alors que les hautes fréquences la dissipent. Il est alors possible de faire une représentation du spectre d'énergie turbulente, Figure 3.1, en échelle logarithmique.

Kolmogorov a déduit des propriétés de la turbulence l'hypothèse d'auto-similarité

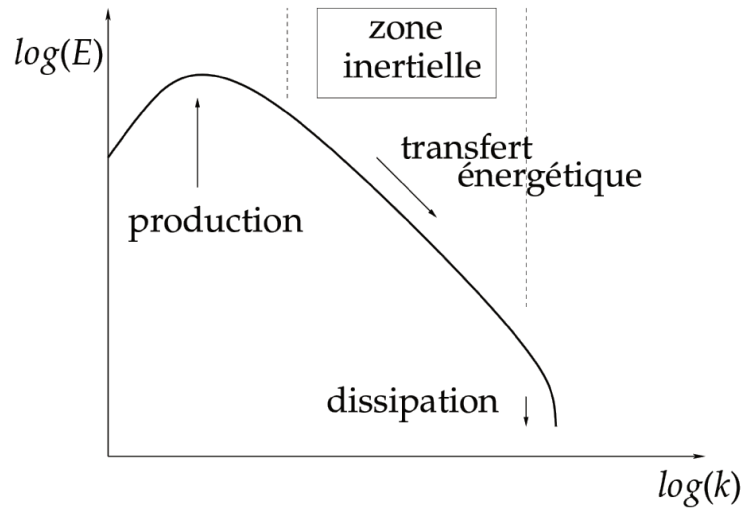


FIGURE 3.1 – Spectre de l'énergie cinétique turbulente

dans la zone inertielle. Ainsi il n'est pas nécessaire de calculer toutes les échelles, mais il est possible de se limiter à celles supérieures à une longueur $\bar{\Delta}$, nommé échelle de coupure. Les plus grandes échelles sont ainsi résolues alors que les plus petites seront modélisées grâce à des termes de sous mailles. Ces termes doivent normalement rendre compte de l'interaction des échelles modélisées avec les échelles résolues. Nous pouvons représenter cette échelle de coupure sur le spectre de l'énergie turbulente, figure 3.2, par une fréquence de coupure $k_c = \pi/\bar{\Delta}$. Le choix de la fréquence de coupure est important. Il dépend de la résolution que l'on souhaite atteindre. L'échelle de coupure détermine aussi l'effet de la modélisation. Plus la fréquence de coupure est basse plus il y aura des phénomènes à prendre en compte dans la modélisation. Et inversement plus la fréquence de coupure est haute, plus la gamme d'échelles résolues est importante. Cela équivaut donc à dire que la simulation aux grandes échelles tend vers des simulations numériques directes lorsque l'on augmente la fréquence de coupure. Les termes de sous mailles et donc les modèles associés ont alors un rôle de plus en plus faible dans l'écoulement.

Pour établir les équations résolues en LES, la notion de filtrage est utilisée. Appliquer un filtre passe bas revient à conserver les basses fréquences, tout en supprimant les hautes fréquences et donc les petites échelles. Le formalisme LES peut alors être vu comme une DNS filtrée sur laquelle il faut ajouter des contributions de sous mailles

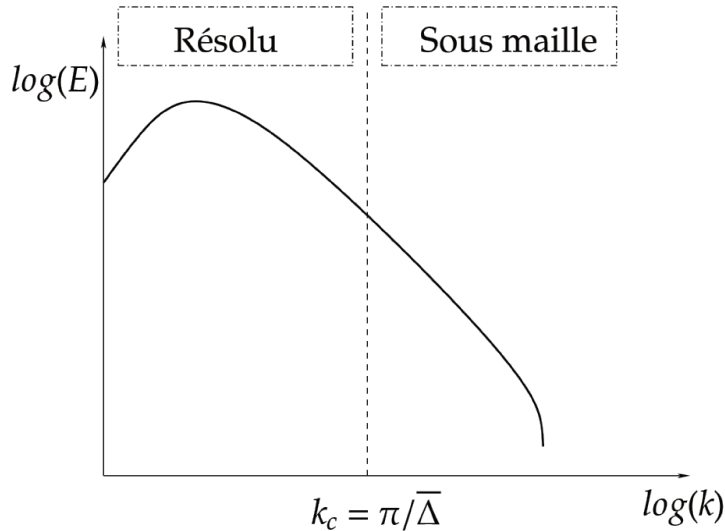


FIGURE 3.2 – Spectres de l'énergie résolue et modélisée, séparés par la fréquence de coupure K_c

pour représenter l'effet des échelles non résolues sur la partie résolue.

3.1.2 Intérêts de la LES

L'idée de base de la LES, à savoir la séparation d'échelle, va permettre de résoudre uniquement les grandes échelles de l'écoulement. Ceci va ainsi permettre d'augmenter de manière conséquente la taille de la maille et donc de diminuer le coût numérique par rapport à une résolution directe. Dans ce paragraphe, nous discuterons des avantages et des inconvénients de ce formalisme.

Avantages :

- Large gamme d'écoulement "possible". Ceci est dû à "l'universalité" de la cascade d'énergie. On suppose que ce sont les grandes échelles qui sont les plus sensibles au type d'écoulement. Ainsi on peut supposer que la modélisation des termes de sous mailles est simple comparée aux méthodes RANS où toutes les fluctuations doivent être modélisées.
- L'approche LES permet de profiter de la puissance des calculateurs pour améliorer les simulations. Si certains aspects de la modélisation ne sont pas parfaits,

on peut en réduire l'impact en augmentant la taille du maillage et ainsi réduire l'échelle de coupure.

- Coût numérique inférieur à celui d'une DNS. En effet, seules les grandes échelles sont résolues, il est donc possible d'avoir un maillage adapté à notre besoin (i.e une maille LES est plus grande qu'une maille DNS). Cela laisse entrevoir un coût numérique plus faible, autant d'un point de vue mémoire ou encore d'un point de vue de la condition numérique sur le pas de temps liée à la taille de maille comme par exemple le CFL (Courant-Friedrichs-Lewy). [90]

Inconvénients :

- Le formalisme LES impose une certaine indépendance des petites structures vis-à-vis de la géométrie de l'écoulement. Or ceci peut devenir problématique en proche paroi lorsqu'une couche limite apparaît. En effet, dans les couches limites se développent les plus petites échelles tourbillonnaires, il faut être en mesure de capturer tous les phénomènes nécessitant ainsi une très bonne résolution spatiale, annulant ainsi une partie des gains obtenus avec l'approche LES.
- Coût numérique non négligeable, même si celui-ci est inférieur à une simulation numérique directe. Du coup le formalisme est encore peu utilisé dans des configurations industrielles.
- De nombreux développements doivent être réalisés afin de pouvoir simuler des écoulements complexes contenant des discontinuités. Comme des ondes de chocs ou encore comme dans notre cas des écoulements diphasiques.

Le travail effectué durant cette thèse se consacre à l'étude de ce dernier point. Et pour être plus précis il s'attache au passage local du formalisme LES au formalisme DNS (et réciproquement) dans le cadre d'un écoulement contenant une interface.

3.1.3 Équations de Navier-Stokes monophasiques

Les équations gouvernant l'évolution d'un fluide newtonien incompressible sont les suivantes :

- Conservation de la masse

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.1)$$

- Conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] \quad (3.2)$$

Avec le champ de vitesse $u = (u_1, u_2, u_3)$ exprimé dans le référentiel cartésien de coordonnées $x = (x_1, x_2, x_3)$, où P est la pression, μ la viscosité cinématique. Dans les conditions incompressibles ρ , la densité est constante.

3.1.4 Équations de Navier-Stokes filtrées

Si on applique un filtre homogène qui vérifie les propriétés de linéarité, de conservation des constantes et de commutation avec les dérivées sur les équations de Navier-Stokes 3.1 et 3.2 on obtient les équations ci-dessous :

- Conservation de la masse

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.3)$$

- Conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right] \quad (3.4)$$

Le fait que la densité soit constante et la linéarité du filtre permettent d'extraire la densité des équations et de la traiter uniquement comme une constante. De plus on peut définir le tenseur de sous maille τ_{ij} tel que :

$$\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j \quad (3.5)$$

On peut alors réécrire l'équation 3.4 comme :

$$\frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right] - \frac{\partial \rho \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (3.6)$$

On remarque que le système d'équations qui gouverne \bar{u} est similaire à celui qui gouverne u . La seule différence vient du terme de sous maille τ_{ij} apparaissant dans l'équation de la conservation de la quantité de mouvement 3.6.

Il n'est pas possible d'obtenir le tenseur de sous maille de façon directe puisqu'il faudrait être en mesure d'avoir simultanément les valeurs de u et \bar{u} . Or via les équations de la LES, seuls les champs résolus sont connus, soit \bar{u} . Il faudra donc modéliser le terme de sous maille τ_{ij} .

3.1.5 Modélisation de sous maille

Comme nous l'avons vu dans la section précédente l'opération de filtrage appliquée aux équations de Navier-Stokes fait intervenir un terme de sous maille. Il faut

donc modéliser ce terme afin de fermer le système d'équations. Ce terme est modélisé en utilisant les conditions physiques connues et en s'appuyant sur les variables hydrodynamiques résolues. Il est toutefois possible d'introduire de nouvelles variables (κ, ϵ, \dots). Toute la problématique de la modélisation de sous maille est d'exprimer les termes de sous maille comme une fonction dépendant du champ de vitesse résolu \bar{u} et de l'échelle de coupure $\bar{\Delta}$.

La modélisation de sous maille a fait l'objet de nombreuses études et de nombreux développements. Encore aujourd'hui, ce domaine est en pleine expansion. Une revue détaillée sur les modèles existants peut être trouvée par exemple dans le livre de P. Sagaut [91]. Dans ce contexte nous ne détaillerons que les modèles les plus classiques.

3.1.5.a Modèle de viscosité

Dans le but de fermer l'équation filtrée de la vitesse, un modèle pour le tenseur de sous maille τ_{ij} est nécessaire. Le modèle de base reprend l'hypothèse de J. Boussinesq [92], qui propose de relier les contraintes turbulentes aux moyennes de l'écoulement. On peut alors écrire :

$$-\frac{\partial \tau_{ij}^a}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \nu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) \quad (3.7)$$

Comme le modèle considère un tenseur de trace nulle, il est possible de définir τ_{ij}^a comme la partie anisotrope de τ_{ij} :

$$\tau_{ij}^a = \tau_{ij} - \frac{1}{3} \tau_{kk} \delta_{ij} \quad (3.8)$$

Avec δ_{ij} le symbole de Kronecker. Il est ainsi possible de réécrire l'équation de conservation de la quantité de mouvement comme :

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left((\nu + \nu_t) \left(\frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{1}{3} \tau_{kk} \delta_{ij} \quad (3.9)$$

Or la partie isotrope $\frac{1}{3} \tau_{kk} \delta_{ij}$ est identiquement nulle en incompressible. L'équation de la conservation de la quantité de mouvement se réécrit alors :

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left((\nu + \nu_t) \left(\frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) \right) \quad (3.10)$$

Il ne reste plus qu'à exprimer la viscosité turbulente qui doit prendre en compte la dissipation de l'énergie des petites échelles. Des analyses dimensionnelles ont montré

que ν_t devait s'écrire comme un produit d'une longueur caractéristique l_c et d'une vitesse caractéristique u_c .

3.1.5.b Modèle de Smagorinsky

Le modèle le plus simple pour fermer le système d'équations est de déterminer ν_t , ce qui est proposé par J. Smagorinsky [88]. Un choix naturel pour la longueur caractéristique est de prendre la taille du filtre $\bar{\Delta}$ et de prendre comme vitesse caractéristique $u_c = \bar{\Delta}|\bar{S}|$ avec $|\bar{S}|$ une mesure du tenseur de taux de déformation \bar{S} , s'écrivant :

$$\bar{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) \quad (3.11)$$

Il est alors possible d'écrire la viscosité turbulente ν_t comme :

$$\nu_t = (C_s \bar{\Delta})^2 \sqrt{2 \bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij}} = (C_s \bar{\Delta})^2 |\bar{S}| \quad (3.12)$$

Avec C_s une constante du modèle variant généralement entre 0.1 et 0.2 suivant les écoulements simulés. Cette constante est un paramètre de la géométrie et des conditions initiales de l'écoulement.

Certains auteurs se sont demandés si cette constante C_s pouvait être déterminée en fonction des échelles résolues. Dans ces conditions la constante n'est plus perçue d'un point de vue global mais local. C_s n'est alors plus une constante mais un paramètre qui varie dans le temps et l'espace mais aussi en fonction des échelles résolues. C'est le principe de base des modèles dynamiques qui ne seront pas plus développés dans ce manuscrit, aussi pour aller plus loin le lecteur peut se référer au livre de Germano [93].

3.1.5.c Modèle de similarité d'échelles

Le modèle de similarité d'échelles est basé sur un double filtrage et sur l'idée que les contraintes non résolues sont principalement contrôlées par les grandes structures non résolues, qui sont similaires aux petites structures résolues, figure 3.3. Le tenseur de sous-maille est ensuite évalué à l'aide de :

$$\tau_{ij} = \alpha (\overline{\bar{u}_i \bar{u}_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j) \quad (3.13)$$

Cette hypothèse revient à découper en trois le spectre d'énergie : les plus grandes échelles résolues, les plus petites échelles résolues (celles qui servent à évaluer le tenseur sous-maille) et les échelles non résolues. La similarité de structure peut s'expliquer

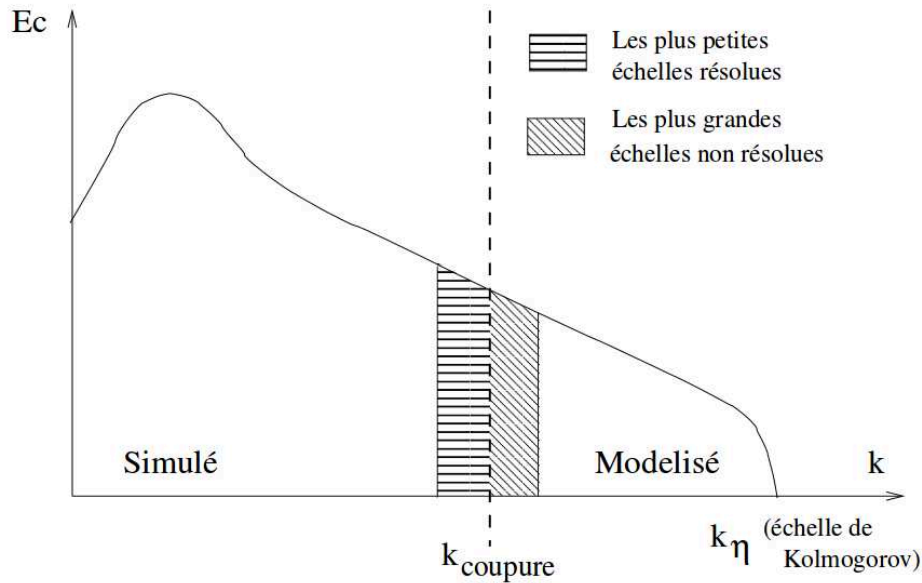


FIGURE 3.3 – Décomposition spectrale basée sur l’hypothèse de similarité d’échelles

de la façon suivante : les échelles non résolues et les petites échelles résolues subissent de façon similaire l’influence des plus grandes échelles résolues.

3.1.6 Approche MonoFluide

Dans le cadre des écoulements incompressibles et immiscibles, on suppose que la masse volumique ρ et la viscosité dynamique μ sont constantes dans chaque phase. On écrit les équations pour chaque phase dans un domaine Ω_k (dans le cas diphasique liquide-gaz, on a $k=g$ lorsqu’il s’agit de la phase gazeuse et $k=l$ pour la phase liquide).

- Conservation de la masse

$$\frac{\partial u_i^k}{\partial x_i} = 0 \tag{3.14}$$

- Conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial \rho_k u_i^k}{\partial t} + \frac{\partial \rho_k u_i^k u_j^k}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \mu_k \left(\frac{\partial u_i^k}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j^k}{\partial x_i} \right) \tag{3.15}$$

De plus il est nécessaire de connaître la phase dans laquelle on se trouve. Une fonction indicatrice χ doit alors être définie telle que :

$$\chi_k(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in \Omega_k \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (3.16)$$

On remarque que cette fonction χ_k est l'équivalent de la fonction VoF. Les propriétés de la fonction χ_k sont les suivantes :

$$\sum_k \chi_k = 1 \quad (3.17)$$

et

$$\frac{\partial \chi_k}{\partial x_i} = -\vec{n}_{ik} \delta_\Gamma \quad (3.18)$$

Avec \vec{n}_k la normale à l'interface orientée vers l'extérieur de la phase k et δ_Γ une mesure de Dirac sur l'interface.

De plus l'équation de transport de χ_k s'écrit de façon classique :

$$\frac{\partial \chi_k}{\partial t} + u_i^\Gamma \frac{\partial \chi_k}{\partial x_j} = 0 \quad (3.19)$$

avec u_i^Γ la vitesse au niveau de l'interface.

Enfin, on a les relations de saut suivantes (Delhay 1974) [94] :

- Relation de saut pour le bilan de masse à l'interface

$$\sum_k \rho_k (u_i^k - u_i^\Gamma) \vec{n}_i^k = 0 \quad (3.20)$$

Si on définit le débit massique $\dot{m}_k = \rho_k (u_i^k - u_i^\Gamma) \vec{n}_i^k$. Cette relation revient à dire que le débit massique d'une phase est l'inverse du débit massique de l'autre phase.

- Relation de saut pour quantité de mouvement à l'interface

$$\sum_k (\rho_k \dot{m}_k - \vec{n}_k (S_{ij}^k - P_k \mathbf{I})) + \sigma \kappa \vec{n}_i \delta_\Gamma = 0 \quad (3.21)$$

où \mathbf{I} représente l'opérateur identité.

On veut obtenir des équations globales valables pour tout le domaine Ω et pour toutes les phases. Une proposition est donc de multiplier les équations 3.14 et 3.15 par la fonction indicatrice. On soustrait ensuite certains termes grâce aux équations de propriétés 3.17 et 3.18 et à l'équation de transport 3.19. On obtient alors le système ci dessous :

- Equation monofluide de bilan de masse :

$$\sum_k \left(\frac{\partial \chi_k u_i^k}{\partial x_i} + u_i^k \vec{n}_i^k \delta_\Gamma \right) = 0 \quad (3.22)$$

- Equation monofluide de bilan de quantité de mouvement :

$$\begin{aligned} \sum_k \left(\frac{\partial \rho_k \chi_k u_i^k}{\partial t} + \frac{\partial \rho_k \chi_k u_i^k u_j^k}{\partial x_j} \right) = & - \sum_k \left(\frac{\partial \chi_k P_k}{\partial x_i} \right) + \sum_k \left(- \frac{\partial \chi_k S_{ij}}{\partial x_i} \right) \\ & + \sum_k \left(\rho_k \dot{m}_k - \vec{n}_k (S_{ij}^k - P_k \mathbf{I}) \right) \end{aligned} \quad (3.23)$$

En utilisant les grandeurs monofluides $u_i = \sum_k \chi_k u_i^k$ et les relations de saut, il est possible de montrer que le système ci-dessous permet de décrire la dynamique d'un écoulement diphasique, isotherme et incompressible :

- Conservation de la masse

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.24)$$

- Conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = - \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \sigma \kappa \vec{n}_i \delta_\Gamma \quad (3.25)$$

- Equation de transport de l'interface

$$\frac{\partial \chi_k}{\partial t} + u_i \frac{\partial \chi_k}{\partial x_j} = 0 \quad (3.26)$$

Dans la suite du manuscrit nous ferons référence à ce système d'équations 3.24, 3.25 et 3.26 lorsque nous voudrions décrire un écoulement diphasique incompressible.

3.1.7 Filtrage des équations monofluides

L'objectif de cette section est d'établir les équations monofluides filtrées en faisant apparaître les termes qu'il sera nécessaire de modéliser pour que le système soit fermé. Le terme de sous-maille dû à la convection est toujours présent mais d'autres termes vont aussi apparaître.

On applique le filtre aux équations et on introduit les inconnues principales suivantes :

- La vitesse filtrée $\bar{u} = \overline{\chi_l u_l + \chi_g u_g}$
- La pression filtrée $\bar{P} = \overline{\chi_l P_l + \chi_g P_g}$

- Le taux de présence de la phase k ou liquide : $\alpha = \bar{\chi}_k$

On peut écrire le système d'équations filtrées spécifiques aux écoulements diphasiques et turbulents, comme :

- Conservation de la masse filtrée

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.27)$$

- Conservation de la quantité de mouvement filtrée

$$\frac{\partial \bar{\rho} \bar{u}_i + \tau_{\rho u_i}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j + \tau_{\rho u_i u_j}}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\mu} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) + \tau_{S_{ij}} \right) - \tau_\sigma \quad (3.28)$$

- Equation de transport de l'interface filtrée

$$\frac{\partial \bar{\chi}_k}{\partial t} + \bar{u}_i \frac{\partial \bar{\chi}_k}{\partial x_j} + \tau_\chi = 0 \quad (3.29)$$

avec

$$\tau_\chi = \overline{u_i \frac{\partial \chi}{\partial x_i}} - \bar{u}_i \frac{\partial \bar{\chi}}{\partial x_i} \quad (3.30)$$

$$\tau_{\rho u_i} = \overline{\rho u_i} - \bar{\rho} \bar{u}_i \quad (3.31)$$

$$\tau_{\rho u_i u_j} = \overline{\rho u_i u_j} - \bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j \quad (3.32)$$

$$\tau_{S_{ij}} = \overline{\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)} - \bar{\mu} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.33)$$

$$\tau_\sigma = \overline{\sigma \kappa \vec{n}_i \delta_\Gamma} \quad (3.34)$$

Précisons l'origine de chacun de ces termes de sous-maille :

- Le terme τ_χ est le terme de sous-maille lié à l'équation indicatrice filtrée. Ce terme est issu des déformations de l'interface sous résolues et il est dû à la corrélation entre la vitesse et la normale à l'interface.
- Le terme $\tau_{\rho u_i}$ est le terme de sous-maille temporel. Il est dû à la corrélation entre la vitesse et la masse volumique, puisque la masse volumique est discontinue au niveau de l'interface.
- Le terme $\tau_{\rho u_i u_j}$ est le terme de sous-maille de convection. Ce terme existe dans les équations monophasiques incompressibles sauf qu'il n'est pas dépendant de la masse volumique car celle-ci est constante. En diphasique, le terme de sous-maille est donc une corrélation triple entre la masse volumique et les fluctuations de vitesses u' .

- Le terme $\tau_{S_{ij}}$ est le terme de sous-maille lié au terme visqueux. Comme le terme $\tau_{\rho u_i}$, il est dû aux discontinuités de μ à l'interface. Pour être plus précis il est dû à la corrélation entre la vitesse et viscosité.
- Le terme τ_σ est le terme de sous-maille lié aux forces de tension superficielle. Ce terme correspond à la corrélation entre la normale à l'interface et la courbure de l'interface. Contrairement aux autres termes il n'est pas judicieux de réécrire ce terme comme une différence avec un terme pour la courbure moyenne, car il n'est pas évident de définir la position de la surface moyenne et les forces de tension de surface sont surtout importantes pour les courbures de sous maille.

On remarque que tous les termes de sous-mailles (sauf le terme de convection) sont liés au caractère diphasique de l'écoulement. Les discontinuités de phases, viscosité et masse volumique sont à l'origine des termes de sous-mailles. Loin de l'interface (i.e en dehors du noyau de convolution du filtre) ces termes sont nuls, on revient alors à une formulation monophasique.

3.1.8 Modélisation de sous maille

Des tests a priori ont été réalisés par J. Chesnel [2] et A. Toutant [95] à partir de DNS sur différents types d'écoulements (ne concernant cependant pas des interfaces très fortement déformées ou de petites tailles) afin de hiérarchiser les termes de sous-mailles.

Ils ont permis d'établir la hiérarchie suivante pour l'importance relative des termes de sous-maille dans l'équation de bilan de quantité de mouvement :

$$\left\| \frac{\partial \tau_{\rho u_i u_j}}{\partial x_j} \right\| > \left\| \frac{\partial \tau_{\rho u_i}}{\partial t} \right\| \gg \left\| \frac{\partial \tau_{S_{ij}}}{\partial x_j} \right\| \gg \|\tau_\sigma\| \quad (3.35)$$

Par conséquent il est possible de négliger les termes de sous-maille liés au terme visqueux et aux forces interfaciales devant ceux liés à la convection et au temps.

J. Chesnel a ensuite réalisé des tests a priori avec les modèles de Smagorinsky et de similarité d'échelles sur les différentes contributions de sous mailles : convective, temporelle et interfaciale. Ceux ci ont montré qu'aucun modèle n'était capable de reproduire parfaitement les contributions de sous mailles. Le modèle de Smagorinsky permet de reproduire les effets de sous maille sans pour autant reproduire la forme du tenseur de sous maille. Alors que le modèle de similarité d'échelles permet lui de

mieux reproduire les contributions de sous maille. Cependant l'effet cumulatif de ce terme dans le temps peut donner des résultats éventuellement irréalistes.

Dans sa thèse J. Chesnel a choisi d'opter pour le modèle de similarité d'échelles. Celui-ci s'est révélé judicieux pour le terme interfacial τ_χ mais peut rendre les simulations instables vis-à-vis de la résolution de l'équation de transport de la quantité de mouvement. L'effet cumulé d'un modèle diffusif de type Smagorinsky est moins proche des résultats instationnaires d'analyse sur des DNS filtrée, cependant il a un comportement plus réaliste. La fermeture de ce terme reste encore un problème.

3.2 Problématique de l'approche LES de l'atomisation

L'approche LES est particulièrement bien développée dans le cadre monophasique et principalement dans les cas gazeux, cependant ce n'est pas le cas pour les écoulements liquide/gaz. En effet ce type d'écoulement conduit à des problématiques bien particulières. D'une part, par rapport aux cas purement gazeux ou purement liquides, le filtrage des équations monofluides fait apparaître des termes de sous maille supplémentaires. C'est ce que nous avons vu dans la section précédente.

D'autre part, d'un point de vue pratique, l'autre problématique est celle de la méthode de suivi d'interface qui influe de façon significative sur la prise en compte des sauts des variables à travers l'interface et de la description des forces de tension de surface à l'interface liquide/gaz. Il existe des outils numériques de suivi d'interface, développés dans le cadre DNS, permettant de résoudre le transport de l'interface liquide/gaz de façon explicite sur les mailles de calcul. On peut citer à titre d'exemple les méthodes VOF [9], level-set [34], front-tracking [96] ou encore toutes les combinaisons possibles de ces 3 méthodes de base, comme la méthode CLSVOF (Coupled LevelSet VOF) développée dans la thèse de Ménard [1]. Ces méthodes prennent en compte les discontinuités à l'interface liquide gaz et les forces de tension de surface. Ces méthodes de suivi d'interface cherchent à résoudre le type suivant d'équation :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial u_i C}{\partial x_i} = 0 \quad (3.36)$$

avec C la fonction indicatrice de phase, qui peut être ici soit la fraction volumique de liquide soit la fonction level-Set.

Ces méthodes de suivi d'interface attachent une importance particulière à garder une vision discontinue de l'interface. D'un point de vue pratique, la difficulté est de transporter une fonction discontinue. Pour préserver la stabilité il faut introduire des schémas numériques spécifiques qui évitent le phénomène de diffusion. La résolution de l'équation 3.36 implique une forte corrélation entre les échelles minimales de l'interface que la méthode peut résoudre et la taille des cellules de calcul. Clairement, l'échelle minimale l_{min} de résolution est de l'ordre Δ , la taille de la maille de calcul :

$$l_{min} = \sqrt[3]{\Delta_x \Delta_y \Delta_z} \quad (3.37)$$

Avec Δ_x, Δ_y et Δ_z la taille de la maille dans les 3 directions de l'espace (x,y,z). Une illustration de ce phénomène est donnée par à des simulations menées dans la thèse de Ménard [1]. La figure 3.6 présente l'interface liquide/gaz dans les 3 cas pour un jet pleinement développé. Le cas (a) montre les déformations et les déstabilisations initiales de l'interface, puis rapidement la rupture du jet apparait avec la formation de fines structures liquides. Lorsque la taille de la maille de calcul augmente (cas (b) et (c)), on constate de deux choses :

- La taille minimale des structures résolues augmente. En fait, celle-ci est de l'ordre de δ , la taille d'une cellule de calcul. Le maillage influence le spray formé de façon significative, il est également possible de remarquer que les structures sont moins nombreuses.
- La rupture de la colonne liquide se fait plus loin dans l'injection comme l'illustre la figure 3.8. En effet la fraction volumique moyenne de liquide dans la direction de l'injection décroît moins vite lorsque la qualité du maillage décroît aussi.

La résolution du maillage a donc un rôle très important, puisque le fait de ne pas capter les plus petites structures a un impact sur les plus grandes structures (exemple la déstabilisation tardive du jet dans les cas (b) et (c)). Ce problème de "sous-résolution" des structures liquides a également été souligné par De Villier [97] ou encore Leboissetier [98] dans sa thèse. Ainsi, en DNS, il faut s'assurer de pouvoir résoudre toutes les échelles de l'interface, celles-ci ayant un effet à grand échelle sur la dispersion du liquide

Cependant il est impossible de définir la taille minimale des gouttes. En revanche, il est possible de définir un nombre de Weber critique permettant de déterminer une taille de maille limite pour laquelle les gouttes ne sont plus supposées s'atomiser sous l'effet de l'écoulement gazeux. Cependant la rupture de filament ou de film liquide ou encore les interactions gouttes/gouttes peuvent mener à des gouttes dont le rayon est

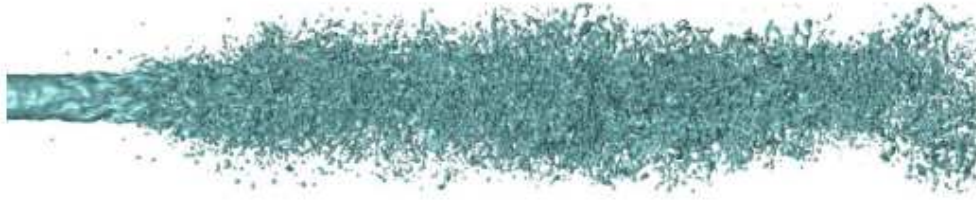
FIGURE 3.4 – Cas (a) DNS, $128^2 \times 1024$ FIGURE 3.5 – Cas (b) DNS, $64^2 \times 512$ FIGURE 3.6 – Cas (c) DNS, $32^2 \times 256$

FIGURE 3.7 – Comparaison d'un Jet DNS

bien inférieur à celui prédit par le nombre de Weber critique.

On comprend alors que l'application directe de ces méthodes de suivi d'interface continue à poser des questions quant à la résolution et cela est d'autant plus vrai dans le cas de la LES. Nous cherchons donc un moyen de résoudre ce problème de "sous résolution". La solution que nous proposons est d'utiliser une méthode de bascule locale du formalisme : le calcul doit être en mesure de passer d'un formalisme DNS à un formalisme LES suivant la résolution de l'interface :

- Si l'interface est bien représentée par le maillage, l'utilisation d'une méthode classique utilisée en DNS comme les méthode VOF ou Level-Set est justifiée,

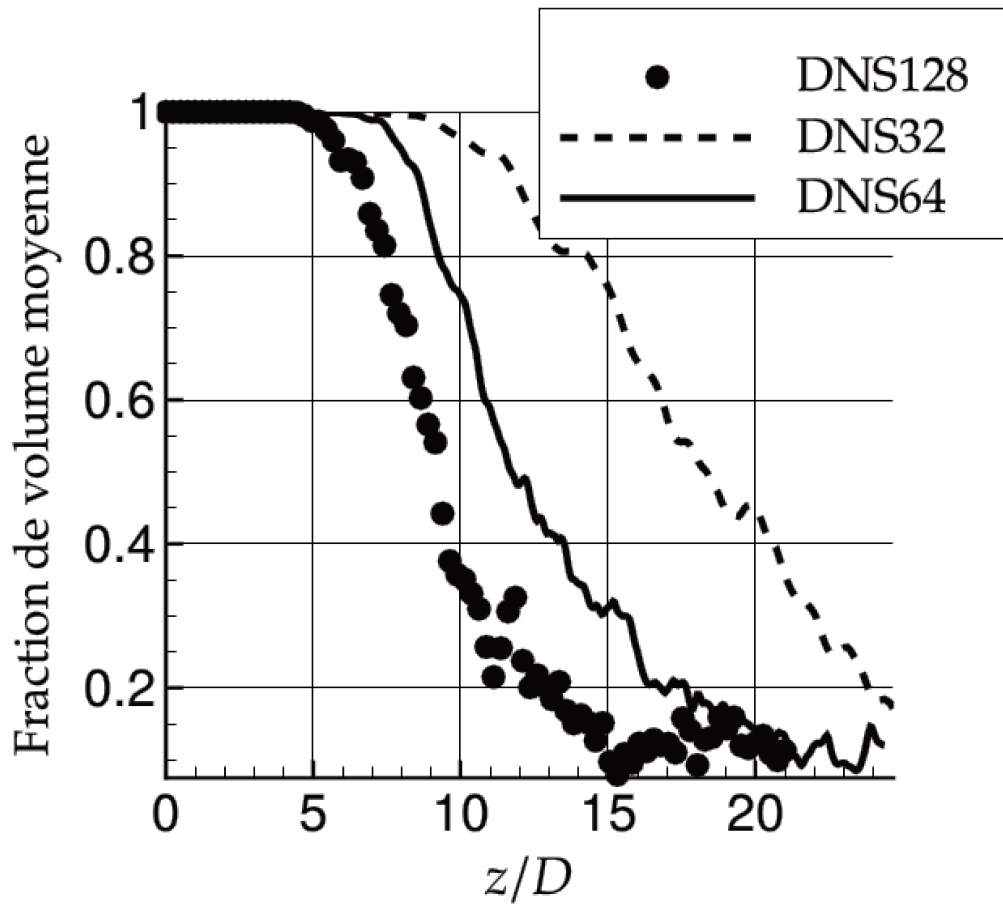


FIGURE 3.8 – Fraction de volume de liquide dans la direction d'injection pour les 3 cas : DNS128, DNS64 et DNS32

cette situation est représentée sur la figure 3.9.

- Si le maillage ne permet plus de capturer tous les changements topologiques de l'interface, par exemple la création de plissements inférieurs à la taille d'une maille. Dans ce cas, le calcul doit reproduire les résultats d'une LES considérant des structures et des gouttes inférieures à la taille de la maille, cette situation est représentée sur la figure 3.9.

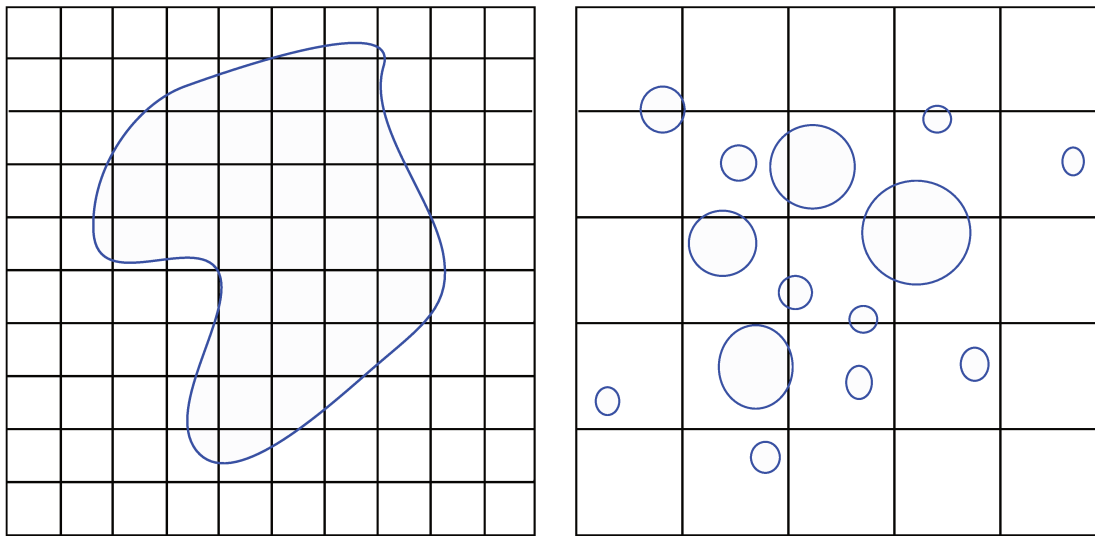


FIGURE 3.9 – Schématisation des différentes résolutions de l'interface en fonction de la taille de la maille de calcul

3.3 Solvateur InterFoam

Dans cette section nous présenterons les équations résolues par le solveur interFoam du code OpenFOAM 2.3.0. [99] Toutes les descriptions de cette section sont basées sur notre analyse du code et des bibliothèques. On remarque toutefois que la version employée durant cette thèse a évolué, puisqu'initialement nous travaillions sur la version OpenFOAM 2.2.0 pour finir sur la 2.4.0 sortie en mai 2015. Ces changements de version n'ont pas été problématiques puisque le traitement de l'advection de la fraction liquide est resté inchangé. Le solveur utilise une discrétisation volumes finis sur des grilles collocalisées pour résoudre les équations d'un écoulement diphasique. Les variables sont définies aux centres des cellules cependant elles sont interpolées aux faces dans la procédure de résolution. Dans un premier temps nous intéresserons à cette méthode de suivi d'interface avec compression de gradient puis à la résolution des équations de Navier-Stokes.

3.3.1 Méthode de suivi d'interface

Comme l'approche VOF [9], l'équation de transport pour l'indicateur de phase, utilise la fraction volumique de liquide. Elle est résolue en même temps que l'équation de continuité et l'équation de conservation de quantité de mouvement :

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.38)$$

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \frac{\partial u_i \alpha}{\partial x_i} = 0 \quad (3.39)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\nu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] + \frac{\mathbf{f}}{\rho} \quad (3.40)$$

Avec u le vecteur vitesse des deux phases, ρ la densité, P la pression et \mathbf{f} les forces de volume. Les forces que l'on retrouve dans les simulations diphasiques sont la gravité et la tension de surface.

Les fluides immiscibles sont considérés comme un seul fluide effectif dans le domaine. La représentation monofluide décrite dans le chapitre 3 est utilisée. Pour rappel les propriétés physiques sont calculées comme une moyenne pondérée par la fraction volumique de liquide. Par exemple la masse volumique se calcule comme

$$\rho = \rho_l \alpha + \rho_g (1 - \alpha) \quad (3.41)$$

avec α la fraction volumique de liquide, ρ_l et ρ_g les densités du liquide et du gaz respectivement.

La fraction volumique de liquide α varie entre 0 et 1. Ces valeurs correspondent aux régions où il n'y a qu'une phase. $\alpha = 0$ est la phase gazeuse alors que $\alpha = 1$ est la phase liquide. Il est donc possible de localiser l'interface liquide gaz à l'endroit où le gradient de la fraction volumique liquide est non nul.

Un des points critiques dans les simulations numériques est la conservation de la masse. C'est d'autant plus vrai lorsque le rapport de densité entre les fluides est important, puisqu'une petite erreur sur la fraction volumique de liquide mène à des erreurs significatives sur les propriétés physiques. Une calcul précis de la fraction volumique de liquide permet une bonne évaluation de la courbure de l'interface, qui est fondamentale dans le calcul de la tension de surface. La région de l'interface entre les deux fluides est généralement contenue sur quelque mailles et est très sensible à la résolution du maillage.

Le solveur OpenFOAM repose sur une approche modifiée similaire à celle proposée par Bae [12]. Ce modèle avancé se fonde sur une formulation à deux fluides dans

le cadre de la méthode des volumes finis. Dans ce modèle un terme convectif supplémentaire naît de la modélisation de la vitesse. Celle-ci étant une moyenne du liquide et du gaz pondérée par les fractions volumiques de ceux-ci. Ce nouveau terme permet une résolution de l'interface plus nette. Le modèle utilise le modèle d'Euler à deux fluides pour l'écoulement à deux phases, où les équations de la fraction de phase sont résolues séparément pour chaque phase, les équations pour chacune des fractions de phase pouvant être exprimées comme :

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \frac{\partial u_i^l \alpha}{\partial x_i} = 0 \quad (3.42)$$

$$\frac{\partial (1 - \alpha)}{\partial t} + \frac{\partial u_i^g (1 - \alpha)}{\partial x_i} = 0 \quad (3.43)$$

Toujours, avec l et g décrivant la phase liquide et la phase gazeuse. On suppose que la contribution de la vitesse du liquide et du gaz à l'évolution de l'interface est proportionnelle à la fraction volumique de liquide. On peut ainsi définir la vitesse effective comme :

$$u = u^l \alpha + u^g (1 - \alpha) \quad (3.44)$$

Si on part de l'équation de transport,

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \frac{\partial u_i^l \alpha}{\partial x_i} = 0 \quad (3.45)$$

On peut définir une vitesse relative comme $u^r = u^l - u^g$, et ainsi exprimer u^g comme :

$$u^g = u^l - u^r \quad (3.46)$$

On remplace dans l'équation 3.44 :

$$u^l = u + (1 - \alpha)u^r \quad (3.47)$$

On injecte la nouvelle formulation de u^l dans l'équation de transport :

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \frac{\partial (u + (1 - \alpha)u_i^r \alpha)}{\partial x_i} = 0 \quad (3.48)$$

Réarranger les termes mène à

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \frac{\partial(u_i \alpha)}{\partial x_i} + \frac{\partial \alpha(1 - \alpha)u_i^r}{\partial x_i} = 0 \quad (3.49)$$

La nouvelle équation de transport de la fraction volumique de liquide contient donc un nouveau terme convectif, que l'on nommera 'terme de compression d'interface' (On nomme ce terme compression mais nous ne faisons en aucun cas référence au fluide compressible). Ce terme est purement numérique, il permet de compresser l'interface. Dans le système discret il n'est pas possible de garder une fonction discontinue, la diffusion numérique lisse cette discontinuité. Ce terme a donc pour rôle de contrer ce phénomène et permet à la fraction volumique de liquide de conserver sa forme discontinue. Ce terme n'a un rôle que sur l'interface et s'annule lorsqu'il se trouve dans une unique phase. Ce terme disparaît dans la formulation continue puisque dans ce cas l'interface liquide/gaz est une fonction saut et ce terme vaut toujours zéro.

Le modèle est fermé en fournissant une expression appropriée de la vitesse relative u_r . Afin de veiller à ce que cette vitesse ne biaise la solution en aucune façon, elle ne doit agir que dans la direction perpendiculaire à l'interface et elle doit être dirigée vers la zone de liquide. On prend comme modèle pour u_r :

$$u_r = \vec{n} \min(C_\alpha \frac{\phi}{S_f}, \max(\frac{\phi}{S_f})) \quad (3.50)$$

Avec ϕ le flux de convection, S_f le vecteur surface d'une cellule, n le vecteur normal et C_α le taux de compression. Ce taux de compression est une variable globale pour tout le maillage et a généralement comme valeur 1. Un taux de compression à $C_\alpha = 0$ permet de rendre nul le terme de compression. Le vecteur normal est calculé comme :

$$\vec{n} = \frac{\nabla \alpha}{|\nabla \alpha|} \quad (3.51)$$

3.3.2 Résolution du couplage Vitesse/Pression

Dans cette section, la procédure de discrétisation des équations de Navier-Stokes utilisée dans *interFoam* sera présentée. Nous allons commencer par la forme incompressible du système donné par l'équation de continuité et l'équation de la conservation de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.52)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\nu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] \quad (3.53)$$

Deux points nécessitent une attention particulière : la non-linéarité de l'équation de la conservation de la quantité de mouvement et du couplage pression - vitesse.

Le terme non-linéaire dans l'équation 3.53 est $\frac{\partial u_i u_j}{\partial x_j}$, la vitesse est "transportée" par elle-même. La forme discrète de cette expression sera quadratique en vitesse et le résultat du système algébrique ne sera toujours pas linéaire. Il existe deux possibilités pour résoudre ce problème, soit on utilise un solveur non-linéaire, soit on linéarise le terme de convection. Ce terme, remis sous forme vectorielle, est discrétisé de la manière suivante :

$$\nabla \cdot (uu) = \sum_f F(u)_f = a_p u_p + \sum_f a_N u_N \quad (3.54)$$

Avec F , a_p et a_N des matrices fonctions de u que l'on fixe dans un premier temps pour garder un système linéaire. On peut corriger ce problème par itérations successives. Les notations N et p font référence au formalisme volume-finis, le p désigne la cellule "propriétaire" de la face alors que le N désigne le "voisin". Pour plus de détails sur la discrétisation du terme convectif vous pouvez vous référer à la thèse de Jasak [100] le principal développeur du code OpenFOAM. Le point important est que les flux F doivent satisfaire l'équation de continuité 3.52, qui doit être résolue avec l'équation 3.54.

Nous allons maintenant présenter le problème du couplage pression-vitesse. Afin d'obtenir la pression, une forme semi-discrétisée de l'équation de mouvement sera utilisée :

$$a_p u_p = \mathbf{H}(u) - \nabla P \quad (3.55)$$

Dans le même esprit que la procédure de Rhie and Chow [101, 102], le gradient de pression n'est pas discrétisé à ce niveau. L'équation 3.55 est obtenue à partir de la forme intégrale de l'équation de la conservation de la quantité de mouvement. Notons que le théorème de la divergence de Gauss sera utilisé tout au long de la procédure de discrétisation, impliquant cette identité :

$$\int_V \nabla \cdot a dV = \oint_{\partial V} a \cdot dS \approx \sum_f S \cdot a_f \quad (3.56)$$

Le terme $\mathbf{H}(u)$ contient les deux parties : La "partie de transport", contenant la matrice de coefficients pour tous les voisins multipliés par les vitesses correspondantes. Et la "partie source" contient les termes connus à l'instant t et les termes sources mis à part le gradient de pression. Dans le cas où il n'y pas d'autre terme source, cela donne :

$$\mathbf{H}(u) = - \sum_f a_N^t u + \frac{u^t}{\Delta t} \quad (3.57)$$

L'équation 3.55 est utilisée pour exprimer u :

$$u_p = \frac{\mathbf{H}(u)}{a_p} - \frac{1}{a_p} \nabla P \quad (3.58)$$

On interpole les vitesses des cellules aux faces : différents schémas numériques peuvent être utilisés :

$$u_f = \left(\frac{\mathbf{H}(u)}{a_p} \right)_f - \frac{1}{a_p} (\nabla P)_f \quad (3.59)$$

La forme discrétisée de l'équation de continuité est :

$$\nabla \cdot u \approx \sum_f S \cdot u_f = 0 \quad (3.60)$$

Lorsque l'équation 3.58 est introduite dans l'équation 3.60, on obtient l'équation de pression suivante :

$$\nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{H}(u)}{a_p} - \frac{1}{a_p} \nabla P \right) = 0 \quad (3.61)$$

on réarrange les termes :

$$\int_v \nabla \cdot \left(\frac{1}{a_p} (\nabla P) \right) dv = \sum_f S \left(\frac{\mathbf{H}(u)}{a_p} \right)_f \quad (3.62)$$

Si on s'intéresse maintenant à la forme discrète complète des équations de Navier-Stoke, on obtient :

$$\int_v a_p \mathbf{u}_p dv = \int_v \mathbf{H}(u) dv - \sum_f S \cdot (\nabla P)_f \quad (3.63)$$

$$\sum_f S. \left[\left(\frac{1}{a_p} \right)_f (\nabla P)_f \right] = \sum_f S. \left(\frac{\mathbf{H}(u)}{a_p} \right)_f \quad (3.64)$$

Les flux sont calculés via l'équation 3.58.

Lorsque l'on considère la forme discrétisée des équations de Navier-Stokes 3.63 et 3.64, la forme des équations montre la dépendance entre la vitesse et la pression. Ce couplage nécessite un algorithme de projection. Pour cela le solveur *interFoam* utilise un algorithme nommé **Pimple**, introduit par Isaac [103] :

- L'équation de conservation de la quantité de mouvement 3.63 est résolue en premier. Le terme source de gradient de pression n'étant pas connu à ce stade, le gradient de pression du pas de temps précédent (instant t) est utilisé à la place. Cette étape est appelée **momentum predictor**. Un nouveau champ de vitesse u^* est ainsi obtenu.
- En utilisant cette vitesses u^* , l'opérateur $\mathbf{H}(u^*)$ peut être calculé via l'équation 3.57 et l'équation de pression peut être résolue via l'équation 3.64. La solution de l'équation de pression donne la première estimation du nouveau champ de pression. Cette étape est appelée **pressure solution**.

$$u_f = S. \left[\left(\frac{\mathbf{H}(u^*)}{a_p} \right)_f - \left(\frac{1}{a_p} \right)_f (\nabla P)_f \right] \quad (3.65)$$

- L'équation 3.65 corrige le champs de vitesse afin qu'il soit compatible avec le nouveau champ de pression et l'équation de continuité. Cette étape est appelée **explicit velocity correction**.

Si on regarde de plus près l'équation 3.58, il apparait que la vitesse corrigée dépend de deux termes. La première correction est due au changement du gradient de pression (le terme $\frac{1}{a_p} \nabla P$) alors que la deuxième correction est liée à l'influence de la correction de la vitesse (le terme $\frac{\mathbf{H}(u)}{a_p}$). Lors de la linéarisation $\mathbf{H}(u)$ a été pris indépendant de u mais comme il en dépend, il est donc nécessaire de corriger le terme $\mathbf{H}(u)$, de reformuler l'équation de pression et refaire la procédure. La boucle revient donc à faire l'étape 1 (**momentum predictor**) puis de faire plusieurs itérations des étapes 2 (**pressure solution**) et 3 (**explicit velocity correction**). La boucle est répétée tant qu'une tolérance prédéfinie n'est pas atteinte pour la vitesse u et la pression P .

3.3.3 Prise en compte de la LES

Dans cette section, la méthode LES utilisée dans nos simulations sera présentée. Dans la section 3.1, nous avons vu les équations diphasiques filtrées. Dans le code OpenFoam le terme de sous-maille convectif prédomine sur les autres. Ceux-ci sont négligeables en comparaison de $\tau_{\rho u_i u_j}$, ils ne sont donc pas modélisés. Le code OpenFoam prend donc le parti de modéliser uniquement le terme $\tau_{\rho u_i u_j}$, les équations deviennent donc les suivantes :

- Conservation de la masse filtrée

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.66)$$

- Conservation de la quantité de mouvement filtrée

$$\frac{\partial \bar{\rho} \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\mu} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right) - \frac{\partial \tau_{\rho u_i u_j}}{\partial x_j} \quad (3.67)$$

- Equation de transport de l'interface filtrée

$$\frac{\partial \bar{\alpha}_k}{\partial t} + \bar{u}_i \frac{\partial \bar{\alpha}_k}{\partial x_i} = 0 \quad (3.68)$$

On remarque que cela correspond au système d'équations de Navier-Stokes incompressible monophasique. Il est alors possible de faire les mêmes hypothèses que dans le cas monophasique. On décompose le terme de sous maille en deux parties :

$$\tau_{\rho u_i u_j} = \tau_{ij} - \frac{1}{3} \tau_{kk} \delta_{ij} \quad (3.69)$$

L'équation de la conservation de la quantité de mouvement filtrée devient alors :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{P}_t}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left((\bar{\mu} + \bar{\mu}_t) \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right) \quad (3.70)$$

Le terme \bar{P}_t correspond à la pression avec l'ajout de la partie isentropique du terme de sous maille et $\bar{\mu}_t = \bar{\rho} \bar{\nu}_t$ correspond à la viscosité dynamique turbulente.

Plusieurs modèles permettant de calculer $\bar{\nu}_t$ sont présents dans le code OpenFoam. Dans ces modèles nous retrouvons les modèles de Smagorinsky et de similarité d'échelles présentés un peu plus tôt dans le chapitre. Nous avons aussi utilisé le modèle One-equation [104]. Il correspond au modèle par défaut d'OpenFoam, et c'est avec ce modèle que les simulations ont été le plus stables.

Le principe de ce modèle est de résoudre une équation de transport pour l'énergie de sous-maille $k_{sgs} = \tau_{kk}/2$ afin d'obtenir l'échelle de vitesse des fluctuations de sous maille. L'équation modélisée s'écrit :

$$\frac{\partial k_{sgs}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_j k_{sgs}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(c_k k_{sgs}^{1/2} \bar{\Delta} + \bar{\nu}) \frac{\partial k_{sgs}}{\partial x_j} \right] + \tau_{ij} \bar{u}_i - c_e \frac{k_{sgs}^{3/2}}{\bar{\Delta}} - \tau_{ij} \bar{S}_{ij} \quad (3.71)$$

Avec c_e et c_k des constantes évaluées dans la littérature [105, 106]. Dans nos simulations, nous prendrons $c_k = 0.07$ et $c_e = 1.05$. Le terme \bar{S}_{ij} correspond lui au tenseur du taux de déformation. La viscosité cinématique turbulente de sous maille est ensuite calculée comme :

$$\bar{\nu}_{sgs} = c_v k_{sgs}^{1/2} \bar{\Delta} \quad (3.72)$$

Ce modèle one-équation a été utilisé par plusieurs chercheurs comme Ulrich Schumann [107] et Daniele Carati and al. [108]. Un des avantages majeurs réside dans le calcul de l'échelle de vitesse qui permet une prescription plus précise de l'échelle de temps par rapport aux modèles algébriques de viscosité. A contrario les autres modèles utilisent l'échelle de temps $|S_{ij}^{-1}|$. Ce tenseur du taux de déformation est fortement affecté par l'écoulement moyen et par les plus grandes structures.

3.4 Changement de formalisme DNS/LES

Dans cette section une méthodologie permettant de changer de formalisme localement sera présentée. Certaines régions seront résolues via un formalisme DNS alors que d'autres régions seront elles résolues via un formalisme de simulation aux grandes échelles. Les différentes régions seront déterminées dynamiquement au cours des simulations, en fonction de la résolution de l'interface liquide gaz.

3.4.1 Idée générale du modèle

L'idée du modèle LES d'atomisation peut être résumée sur la figure 3.10 : Proche de l'injecteur (zone 1 figure 3.10), la zone dense est composée d'un coeur liquide, dont les échelles de longueur de plissement sont supérieures à $\bar{\Delta}$. A cet endroit la contribution de sous maille est nulle, il est donc possible d'utiliser une méthode de suivi d'interface de type DNS, c'est la vision discontinue.

Plus loin dans la phase dispersée (zone 2 figure 3.10), les tailles de gouttes sont inférieures à la taille de la maille LES. Il faut revenir à une vision de spray de sous maille. On pourra utiliser les modélisations issues du formalisme RANS.

Ainsi le but est de disposer d'un modèle prenant en compte la zone dense d'atomisation primaire par une méthode de suivi d'interface et dans la zone dispersée, le spray est transféré en sous maille. A ce niveau, une équation de la densité d'interface permettra d'obtenir des informations sur le nuage de gouttes, (leurs tailles, vitesses et leur répartition spatiale).

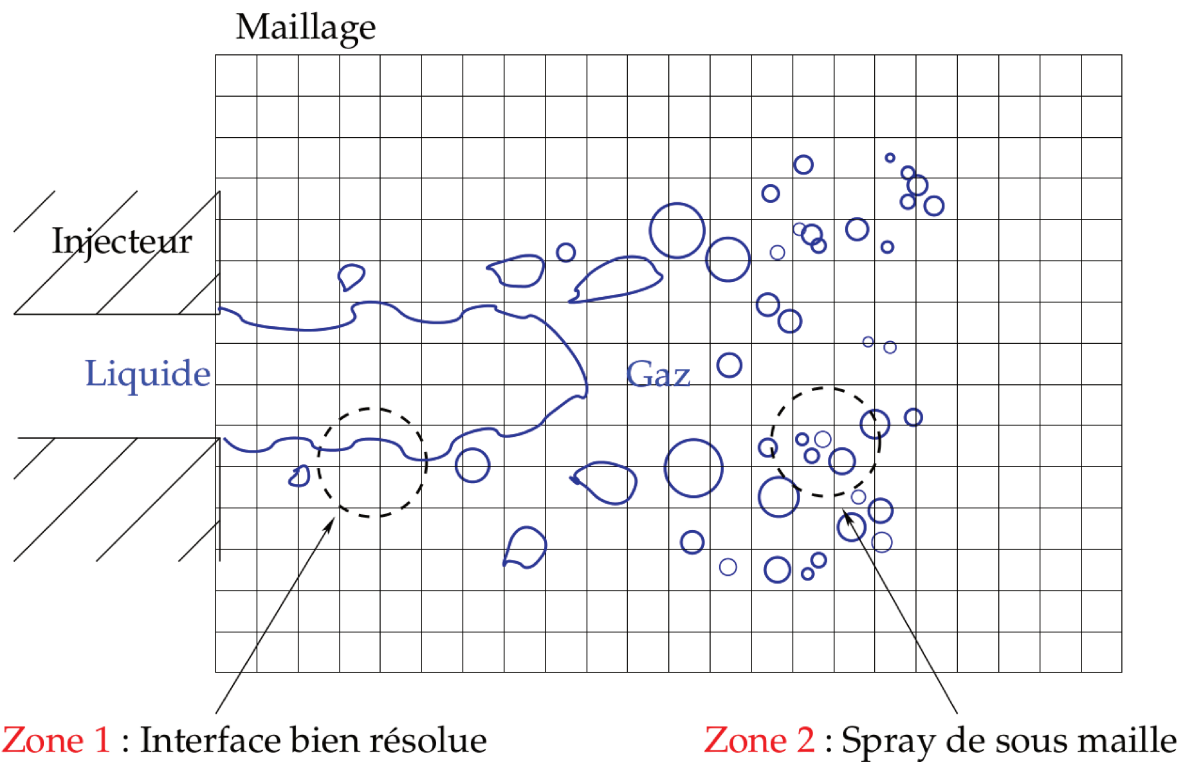


FIGURE 3.10 – Principe du changement de formalisme DNS/LES

3.4.2 Équation à résoudre

Afin de remplir les objectifs du modèle, il faut chercher à résoudre les équations de transport pour la conservation de masse, la quantité de mouvement et la fraction volu-

mique de liquide. On va également décrire les termes de sous maille pour la quantité de mouvement et la fraction volumique de liquide en zone dispersée.

3.4.2.a Gestion de l'équation de transport de l'interface

Une des problématiques majeures est le changement de formalisme. Dans la suite du manuscrit nous appellerons zone DNSI la zone non filtrée : dans cette zone l'interface est bien résolue. Pour maintenir la discontinuité sur le champ de fraction volumique de liquide, l'équation de transport comprend un terme numérique de redresseur de gradient. Les zones ayant une interface sous résolue seront elles appelées zones LES. elles correspondent aux régions filtrées, et l'équation de transport contient un terme de sous-maille.

- Equation de transport de l'interface compressive (DNSI)

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \frac{\partial (u_i \alpha)}{\partial x_i} + \frac{\partial (\alpha(1 - \alpha)u_i^r)}{\partial x_i} = 0 \quad (3.73)$$

- Equation de transport de l'interface filtrée (LES)

$$\frac{\partial \bar{\alpha}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u}_i \bar{\alpha})}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{\alpha i}}{\partial x_j} = 0 \quad (3.74)$$

Pour être en mesure de réaliser un changement local, il faut pouvoir coupler ces deux équations sous la forme d'une équation de transport de l'interface complète (DNSI / LES) :

$$\frac{\partial \bar{\alpha}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u}_i \bar{\alpha})}{\partial x_i} + \frac{\partial (C_\alpha \bar{\alpha} (1 - \bar{\alpha}) u_i^r)}{\partial x_i} + (1 - C_\alpha) \frac{\partial \tau_{\alpha i}}{\partial x_j} = 0 \quad (3.75)$$

Nous ne travaillons plus qu'avec des variables filtrées puisque dans les zones "DNS" nous avons en principe $u = \bar{u}$ et $\alpha = \bar{\alpha}$. Un coefficient C_α été introduit, il est local à chaque cellule. Il vaut 1 dans les zones DNSI et 0 dans les zones LES. Ainsi dans les régions DNSI le terme de sous maille disparaît puisque $(1 - C_\alpha)$ vaut zéro. Et dans les régions LES le terme de compression disparaît de la même façon. On voit ici que la méthode de suivi d'interface basé sur un terme de redresseur de gradient permet aisément le passage d'une méthode à l'autre.

Dans l'équation 3.75 tous les termes sont définis sauf le terme de sous maille $\tau_{\alpha i}$ qui sera décrit dans la section suivante

Enfin il faut maintenant être capable de définir les zones DNSI et LES. Pour cela nous devons déterminer C_α . Et donc définir des critères de transition permettant de déterminer si l'interface liquide/gaz est résolue dans une cellule. Il nous faut des informations sur la topologie de l'interface, pour cela nous utilisons une nouvelle grandeur : la densité d'aire interfaciale.

3.4.2.b Terme de sous maille de transport

Dans cette section nous allons décrire le calcul du terme de sous-maille $\tau_{\alpha i}$:

$$\frac{\partial (\alpha(1-\alpha)u_i^r)}{\partial x_i} = \frac{\overline{\partial u_i \alpha}}{\partial x_i} - \frac{\partial \bar{u}_i \bar{\alpha}}{\partial x_i} \quad (3.76)$$

La modélisation d'un terme de sous-maille équivaut à l'ajout d'un terme de diffusion. Nous avons opté de modéliser le terme τ_α comme une terme diffusif classique :

$$\frac{\partial (\alpha(1-\alpha)u_i^r)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} D_t \frac{\partial \alpha}{\partial x_i} \quad (3.77)$$

Avec D_t une constante représentant un taux de diffusion turbulent. Le travail de Chesnel réalisé au cours sa thèse [2] aurait pu être utilisé. Cependant même si le modèle de similarité d'échelle est compatible localement, il entraîne des instabilités à long terme d'où le terme de diffusion de sous maille.

3.4.2.c Équation de continuité

Cette équation ne change pas quel que soit le formalisme utilisé. L'équation s'écrit :

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.78)$$

3.4.2.d L'équation de la conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial \bar{\rho} \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\mu} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right) - (1 - C_\alpha) \frac{\partial \tau_{\rho u_i u_j}}{\partial x_j} \quad (3.79)$$

Cette équation de transport nécessite quelques explications : Comme pour l'équation de transport de la fraction volumique de liquide, nous avons fait intervenir le coefficient C_α . Pour rappel ce terme est défini comme :

$$C_\alpha = \begin{cases} 1, & \text{si zone DNSI} \\ 0, & \text{si zone LES.} \end{cases} \quad (3.80)$$

Ainsi lorsque l'interface est résolue, le terme $(1 - C_\alpha)\tau_{\rho u_i u_j}$ s'annule et l'équation 3.79 équivaut à l'équation de conservation de la quantité de mouvement en formalisme DNSI (eq) 3.54. Le calcul du terme de sous maille $\tau_{\rho u_i u_j}$ est décrit dans la section 3.3.3.

3.4.3 ELSA : densité interfaciale

Dans cette section nous décrivons le modèle ELSA (Eulerian Lagrangian model for Spray and Atomization). Celui ci à été proposé par Vallet et Borghi en 1999 [22] ou adapté à l'injection automobile par Romain Lebas [3]. Ce modèle permet de décrire la topologie du spray en utilisant une grandeur générale : la densité d'interface. Cette grandeur représente le rapport entre l'aire de l'interface liquide-gaz et le volume de la cellule considérée. Cette grandeur est donc exprimée en m^2/m^3 et s'écrit comme :

$$\Sigma = \frac{\text{Aire interfaciale}}{\text{Volume de contrôle}} \quad (3.81)$$

Ce type de variable peut aussi bien traiter une gouttelette sphérique que le coeur liquide très déformé. Sur la figure 3.11 nous présentons un exemple de cette variable. L'aire interfaciale des structures liquides est représentée en bleu alors que le volume de contrôle est lui mis en rouge.

L'avantage de définir la densité d'interface dans le cas de l'atomisation liquide/gaz est de s'affranchir de la description du spray en terme de gouttes sphériques, c'est d'ailleurs ce qui motive son utilisation ici. Néanmoins, il est toujours possible de raccorder Σ avec cette vision. A titre d'exemple, si l'on fait l'hypothèse que les gouttes sont sphériques avec une distribution mono-disperse au sein du volume de contrôle, on peut alors obtenir le diamètre moyen de Sauter avec :

$$D_{32} = \frac{6\alpha}{\Sigma} \quad (3.82)$$

ou encore la densité volumique de gouttes, notée N :

$$N = \frac{6\alpha}{\pi D_{32}^3} \quad (3.83)$$

Cette quantité est bien adaptée à la simulation aux grandes échelles, puisque le volume de contrôle (maille de calcul) peut être défini comme le noyau de convolution du filtre. Dans ce cas la densité interfaciale peut s'exprimer comme :

$$\bar{\Sigma} = \frac{S_f}{\Delta^3} \quad (3.84)$$

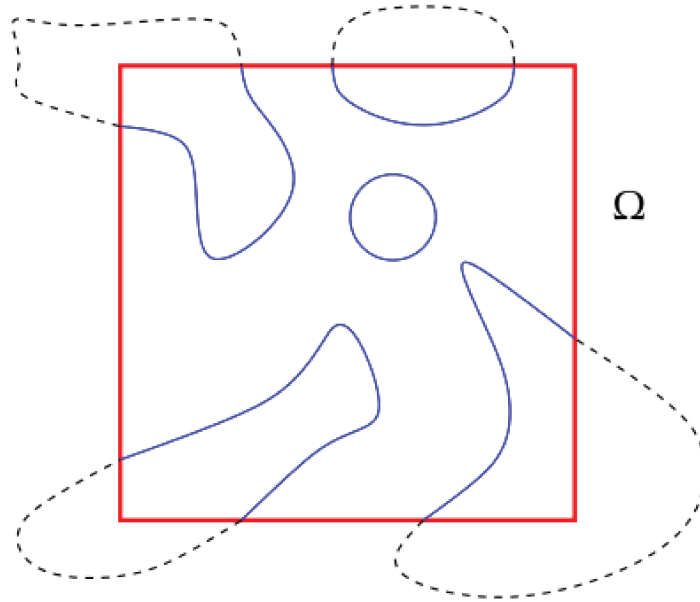


FIGURE 3.11 – Schéma explicatif de la densité interfaciale.

avec S_f la surface de l'interface liquide/gaz dans le volume de contrôle.

Ce modèle est initialement développé pour des simulations RANS. Cependant, dans sa thèse Jérémie Chesnel [2] a proposé une extension dédiée aux simulations LES. Dans ce "nouveau" modèle, la densité interface est décomposée en une variable moyenne $\bar{\Sigma}_{min}$ et en une fluctuation $\bar{\Sigma}'$.

$$\bar{\Sigma} = \bar{\Sigma}' + \bar{\Sigma}_{min} \quad (3.85)$$

$\bar{\Sigma}_{min}$ représente la surface "minimale" que l'on peut trouver au sein d'un volume de contrôle pour une fraction de volume de liquide donnée. En effet, si au sein de ce volume de contrôle, la fraction de volume est telle que $\alpha \in]0, 1[$, alors il doit exister une densité d'interface puisque les 2 phases sont présentes. Et sa valeur est au moins égale à $\bar{\Sigma}_{min}$.

D'un point de vue LES, le terme $\bar{\Sigma}_{min}$ peut être vu comme la densité d'interface résolue. En effet, la simulation aux grandes échelles induit, dans son formalisme, que la résolution d'échelles de plus en plus petites devrait tendre vers une simulation de type

DNS. En ce sens, la décomposition équation 3.85 est en accord avec les principes du modèle LES d'atomisation. En effet, lorsque les échelles de courbure sont bien résolues par le maillage LES, la densité d'interface Σ revient naturellement vers cette densité d'interface résolue $\bar{\Sigma}_{min}$ qui assure l'existence de cette quantité d'interface minimale. Dans les faits, au sein d'un volume de contrôle, cette densité d'interface "minimale" correspond souvent à une interface plane coupant ce volume et Jérémy Chesnel a proposé de l'approximer comme :

$$\bar{\Sigma}_{min} = \frac{2.4\sqrt{\alpha(1-\alpha)}}{\bar{\Delta}} \quad (3.86)$$

Cette formulation a été déterminée en prenant différents cas test comme celui d'un volume de contrôle sphérique. Nous remarquons que nous avons bien le comportement décrit précédemment à savoir $\bar{\Sigma}_{min} = 0$ lorsque $\alpha = 0$ ou $\alpha = 1$. D'autres approximations pourraient être utilisées pour déterminer $\bar{\Sigma}_{min}$ en fonction de la résolution.

Le terme de fluctuation $\bar{\Sigma}'$ est régi par une équation de transport. Celle-ci comporte un terme temporel et un terme convectif standard. Un terme de diffusion faisant apparaître le différentiel entre la vitesse du liquide et la vitesse interfaciale est également présent, tout comme un terme source caractérisant le phénomène de break up et coalescence.

$$\frac{\partial \bar{\Sigma}'}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_i \bar{\Sigma}'}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\Sigma}' (\bar{u}_i - \bar{u}_{\Gamma_i})) + \frac{\bar{\Sigma}}{\tau} \left(1 - \frac{\bar{\Sigma}}{\bar{\Sigma}^*} \right) \quad (3.87)$$

Cette relation rejoint l'idée d'un temps de retour à l'équilibre introduit par Vallet et al [49]. Le terme source $\frac{\bar{\Sigma}}{\tau} \left(1 - \frac{\bar{\Sigma}}{\bar{\Sigma}^*} \right)$ fait tendre la valeur de $\bar{\Sigma}$ vers sa valeur d'équilibre, $\bar{\Sigma}^*$ au bout d'un temps de "relaxation", ici τ . On utilisera pour τ un temps LES relatif à la turbulence. Une piste d'amélioration serait de lier τ à des phénomènes de break up.

La densité d'interface à l'équilibre $\bar{\Sigma}^*$ est la densité d'interface correspondant à un diamètre équilibre. Dans le but de conserver la cohérence de notre formulation, on décompose $\bar{\Sigma}_{crit}$ en une partie moyenne et sa fluctuation :

$$\bar{\Sigma}^* = \bar{\Sigma}_{min} + \bar{\Sigma}'^* \quad (3.88)$$

Afin de modéliser cette fluctuation, on définit un nombre de Weber critique de la manière suivante :

$$We^* = \frac{\bar{\rho}k}{\bar{\sigma}\bar{\Sigma}^*} \quad (3.89)$$

En faisant l'hypothèse que l'on tend vers l'équilibre, lorsque localement les forces d'inertie sont compensées par les forces de tension de surface, alors le nombre de Weber d'équilibre local est de l'ordre de l'unité. Ainsi, à l'instar de Lebas [3] dans la partie dense, on fera l'hypothèse suivante :

$$We^* \approx 1.4 \quad (3.90)$$

Ce qui permet de trouver une approximation de la densité d'interface d'équilibre, $\bar{\Sigma}^*$:

$$\bar{\Sigma}^* = \bar{\Sigma}_{min} + \frac{\bar{\rho}k}{\bar{\sigma}We} \quad (3.91)$$

3.4.4 Critère de transition

Dans cette section, les critères permettant de basculer entre les formalismes sont présentés. Ces critères sont utilisés pour définir le coefficient C_α . Ils sont appelés IRQ (pour *Interface Resolution Quality*). Deux critères ont été définis, le premier IRQ_Σ est basé sur la densité interfaciale alors que le second IRQ_κ est basé sur la courbure de l'interface. Au final, le coefficient C_α est défini comme :

$$C_\alpha = \begin{cases} 1, & \text{si } IRQ_\Sigma < S_1 \text{ et } IRQ_\kappa < S_2 \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases} \quad (3.92)$$

Avec S_1 et S_2 des valeurs seuils pour chaque critère. La valeur de ces valeurs seuils sont déterminées dans le chapitre suivant. Dans les sous parties suivantes, la définition des deux IRQ sera donnée.

3.4.4.a Critère IRQ_Σ

Le critère IRQ_Σ est basé sur la densité interfaciale. Pour rappel la densité interfaciale est définie comme la somme d'une variable moyenne $\bar{\Sigma}_{min}$ et d'une fluctuation $\bar{\Sigma}'$.

$$\bar{\Sigma} = \bar{\Sigma}' + \bar{\Sigma}_{min} \quad (3.93)$$

Le rapport $\bar{\Sigma}_{min}$ sur $\bar{\Sigma}$ représente donc le rapport entre la quantité d'interface résolue et la densité d'interface totale. Lorsque l'interface est bien résolue, la variable $\bar{\Sigma}'$ tend vers 0. Et dans ce cas on a :

$$\bar{\Sigma} = \bar{\Sigma}_{min} \quad (3.94)$$

Ce rapport tend donc vers 1. Dans le cas inverse, c'est-à-dire lorsque l'interface est mal définie, les termes de sous-maille ont une influence non négligeable, cela signifie que le terme $\bar{\Sigma}'$ devient important devant $\bar{\Sigma}_{min}$, et donc le rapport tend vers 0.

Le critère IRQ_{Σ} est donc défini par :

$$IRQ_{\Sigma} = \frac{\text{interface résolue}}{\text{interface total}} = \frac{\bar{\Sigma}_{min}}{\bar{\Sigma}} \quad (3.95)$$

La figure 3.12 illustre la variation de ce critère sur l'isocontour 0.5 de la fraction volumique de liquide. On s'aperçoit que ce critère a une valeur élevée dans du coeur liquide tandis que lors de la formation des ligaments ou de gouttelettes, ce critère a une valeur beaucoup plus faible.

3.4.4.b Critère IRQ_{κ}

Dans cette partie, la définition du deuxième critère de transition est donnée. Celui ci est basé sur la courbure de l'interface liquide gaz. Plus la courbure de l'interface est importante moins celle ci est résolue. En effet si la courbure est importante cela signifie que l'interface se plisse dans la maille. Dans ce cas il est possible de considérer que la taille de la maille n'est pas suffisante pour capturer tous les plissements ou toutes les déformations de l'interface. Cette cellule doit alors être considérée comment étant mal résolue.

Pour rappel la courbure d'une goutte est égale :

$$\kappa = \frac{2}{R} \quad (3.96)$$

avec R le rayon de la goutte.

Nous avons défini le critère IRQ_{κ} comme :

$$IRQ_{\kappa} = \frac{1}{\kappa \Delta} = \frac{R}{2\Delta} \quad (3.97)$$

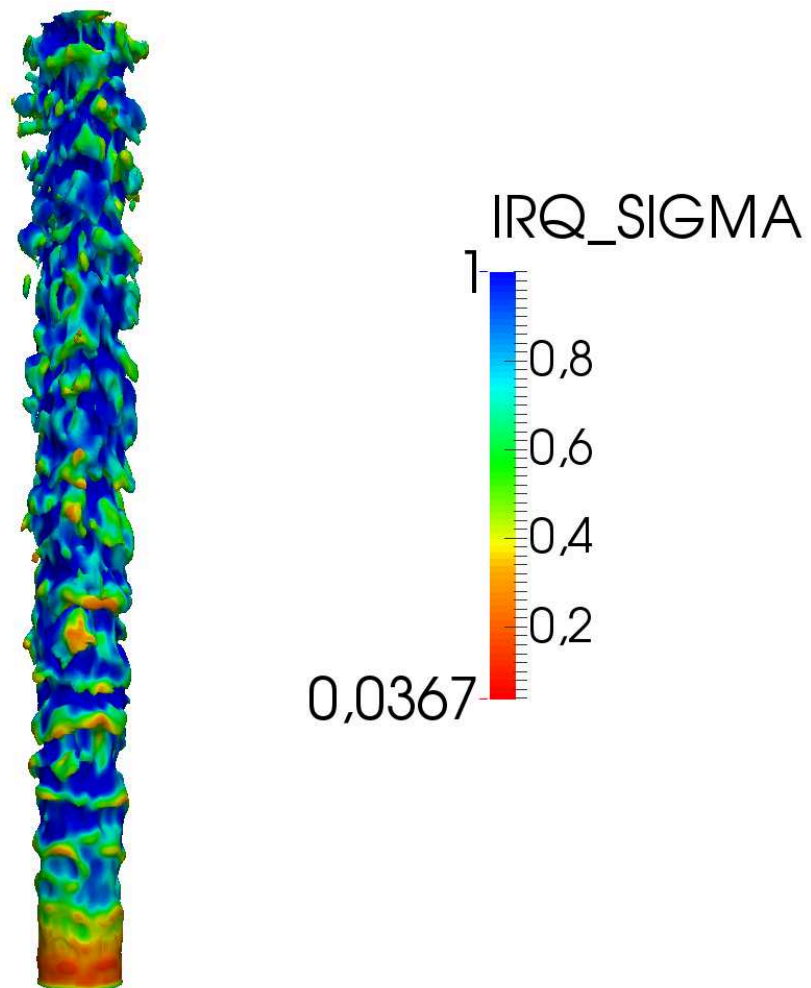


FIGURE 3.12 – Niveau du critère IRQ_{Σ} sur la surface définie comme l'isocontour 0.5 de la fraction volumique de liquide.

avec Δ la taille de la maille de calcul.

Le schéma 3.13 permet de mieux comprendre ce critère. Sur ce schéma est tracée une courbe représentant IRQ_k en fonction de $\frac{R}{\Delta} = \frac{2}{\kappa\Delta}$. La courbure est donc inversement proportionnelle au rapport $\frac{R}{\Delta}$. Lorsque la courbure est nulle, le rapport tend vers ∞ et lorsque la courbure est importante le rapport tend vers 0. Si l'interface liquide gaz peut être représenté par un plan, cela signifie que la courbure est nulle, dans ce cas la valeur de IRQ_k sera ∞ . Si maintenant on s'intéresse au cas où l'interface est une courbe, par exemple dans une goutte de rayon 2Δ , le rapport $\frac{R}{\Delta}$ vaudra donc 2 et IRQ_k aura alors une valeur de 1. Enfin dans le cas d'une goutte de rayon 0.5Δ , IRQ_k vaudra 0.25.

Ainsi il est possible de définir une valeur seuil pour IRQ_k . Au dessus de ce seuil nous considérons l'interface bien résolue, en dessous mal résolue.

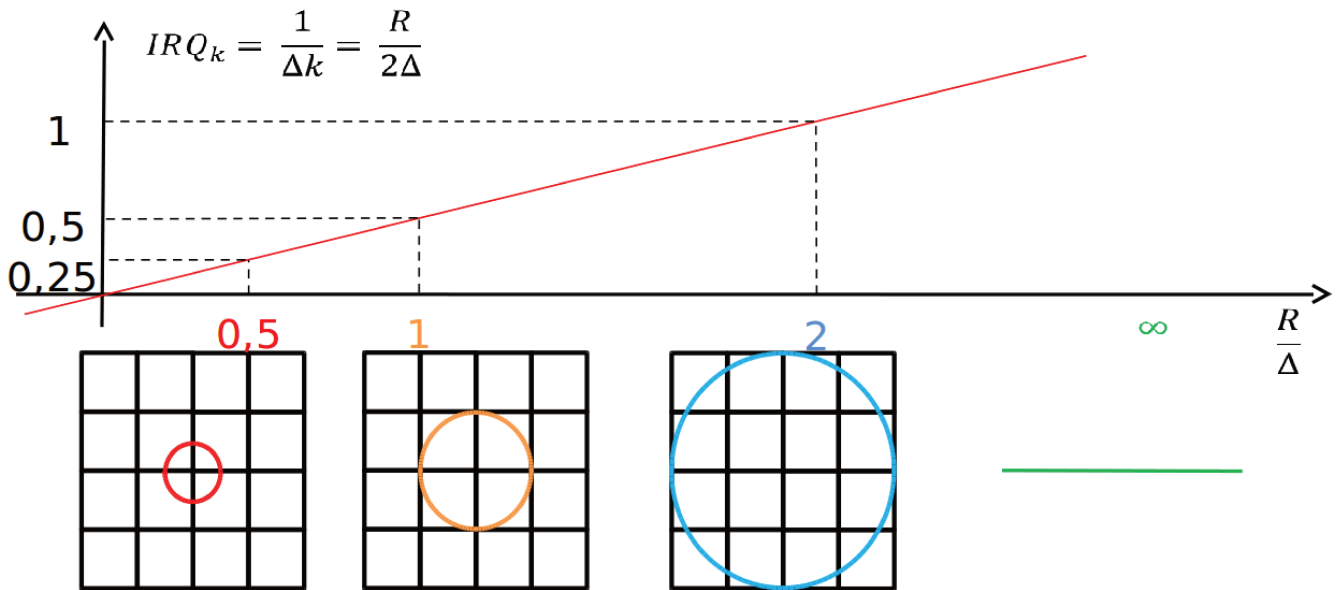


FIGURE 3.13 – Schéma explicatif du critère IRQ_k

La figure 3.14 illustre la variation de ce critère IRQ_k sur l'isocontour 0.5 de la fraction volumique de liquide. On s'aperçoit que ce critère a une valeur importante dans le coeur liquide et lors de la formation des ligaments ou de gouttelettes, ce critère a une

valeur beaucoup plus faible. Si on compare avec le critère IRQ_{Σ} on remarque que le champ de colorisation est très différent.

3.5 Couplage Eulérien/Lagrangien

Dans cette section nous présentons un nouveau type de couplage eulérien/lagrangien. Les particules lagrangiennes serviront à transporter de l'information afin de corriger les champs eulériens dans les zones où le spray est réellement dispersé.

3.5.1 Présentation du couplage

Dans la partie diluée du spray, l'utilisation de méthode eulérienne peut être améliorée. En effet dans ces zones, la fraction volumique de liquide est très faible. Elle représente une ou plusieurs structures liquides de sous-mailles. Ces structures sont donc mal décrites de façon eulérienne et une seule vitesse et un seul diamètre moyen représentent les gouttelettes. Le problème vient du fait que lorsque l'on écrit les équations de la fraction volumique de liquide (ou la densité interfaciale), il faudrait utiliser la vitesse interfaciale, comme le rappelle l'équation ci dessous :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial(u_i C)}{\partial x_i} = 0 \quad (3.98)$$

Or la définition même de la vitesse interfaciale n'a plus réellement de sens dans la zone diluée, car nous ne sommes plus en mesure de capturer cette interface. Pour pallier ce problème il est possible de coupler une approche lagrangienne à la description eulérienne. En zone diluée, des particules lagrangiennes sont générées, celles-ci servent à transporter de l'information (leur vitesse). La vitesse des particules lagrangiennes permet de reconstruire un champ eulérien qui peut être défini comme la vitesse interfaciale. Celle-ci est alors utilisée afin de corriger les équations de transports de la fraction volumique de liquide et de la densité interfaciale.

Il est donc nécessaire de préciser un critère de transformation enfin de déterminer la ou les zones diluées. Un fois ce critère de transformation posé, on définit un ensemble de cellules de transformation à partir duquel sont injectés des échantillons lagrangiens.

Les gouttes lagrangiennes injectées dans les cellules de transition doivent être initialisées en respectant les données physiques calculées dans la partie eulérienne du

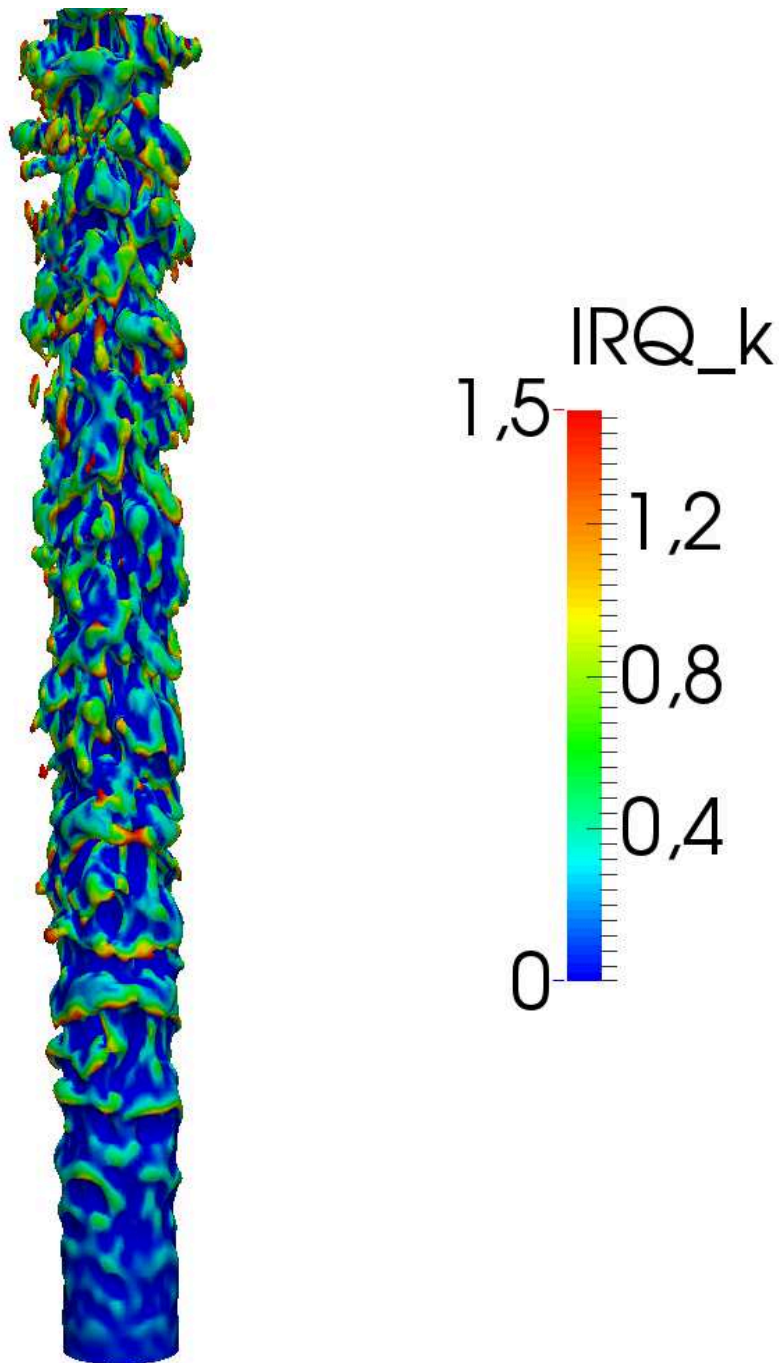


FIGURE 3.14 – Niveau du critère IRQ_k sur la surface définie comme l'isocontour 0.5 de la fraction volumique de liquide.

spray. Ainsi, plusieurs caractéristiques des gouttes lagrangiennes sont extraites de la zone de calcul eulérienne. Ces données sont : la vitesse des gouttes, le diamètre des gouttes et la densité volumique de goutte. Cette dernière grandeur est imposée par la conservation de la masse, une fois le diamètre des gouttes calculé avec la densité d'interface. Il est aussi nécessaire de préciser la position initiale des particules pour initialiser le calcul lagrangien.

Il est à noter que dans les calculs réalisés, une seule particule est injectée dans chacune des cellules de transition. Il serait envisageable d'injecter par cellule de transition une distribution de particules.

3.5.2 Critère de transformation

Le critère de transition entre les zones denses et diluées du spray a été proposé par Blokkeel [109]. L'auteur propose de passer du calcul eulérien au calcul lagrangien, lorsque la distance entre les particules est suffisamment importante. Ce critère revient à définir comme critère de transition un seuil de fraction volumique de liquide. Nous retenons ici le même critère. Le calcul lagrangien est initialisé dans une maille de calcul dès que la fraction volumique de liquide est inférieure à 10%. Les mailles de calculs dans lesquelles les particules lagrangiennes sont générées sont appelées cellules de transformation.

3.5.3 Initialisation des particules lagrangiennes

Afin de quantifier les transferts de masse, quantité de mouvement et énergie lors du transport lagrangien, il est nécessaire de fixer le diamètre des particules. On suppose que les gouttes sont sphériques au moment de la transition. Le diamètre moyen des gouttes est assimilé au diamètre moyen de Sauter. On utilise la fraction de liquide et la densité d'interface liquide/gaz pour définir la taille caractéristique des particules :

$$D_{32} = \frac{6\alpha}{\Sigma} \quad (3.99)$$

Ainsi dans chaque cellule de transformation il n'existe qu'un diamètre mais celui-ci varie dans l'ensemble des cellules de transformation. On dispose alors d'une distribution de tailles de gouttes sur l'ensemble des cellules.

Il faut aussi définir le nombre de gouttes par unité de volume, il est obtenu directement en considérant la conservation de la masse de liquide dans les cellules de transformation :

$$N = \frac{6\alpha}{\pi D_{32}^3} \quad (3.100)$$

Afin d'initialiser le calcul lagrangien, il est aussi nécessaire de spécifier la position initiale des particules. Les nouvelles particules sont injectées au centre des cellules de transformation. Une nouvelle particule ne peut être créée que si la cellule transformation ne contient pas déjà une autre ou d'autres particules.

Enfin la vitesse des gouttes est définie comme étant la vitesse moyenne de la cellule.

3.5.4 Transport des particules lagrangiennes

Il est nécessaire de déplacer les particules. Dans le cas de ce couplage les particules ne représentent pas des structures liquides, elles servent uniquement à transporter une information. Cette information est la vitesse de l'interface. Ces particules sont donc considérées comme des gouttes sphériques et sont transportées via la dynamique de l'écoulement. L'équation de transport des particules est donc la suivante :

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt} = \mathbf{V} \quad (3.101)$$

Avec \mathbf{X} la position de la particule et \mathbf{V} sa vitesse. Pour plus de détails sur les équations lagrangiennes et sur les méthodes de résolution, il faut se référer au chapitre 2.

3.5.5 Couplage Euler -> Lagrange

En formulation lagrangienne, il est possible de définir une fraction volumique liquide lagrangienne :

$$\alpha_l = \frac{1}{V_c} \sum_k N_k \frac{\pi}{6} D_k^3 \quad (3.102)$$

avec N_k le nombre de gouttes par particule stochastique d'indice k et de diamètre D_k . De la même façon il est aussi possible de définir une densité interfaciale lagrangienne :

$$\Sigma_l = \frac{1}{V_c} \sum_k N_k \pi D_k^2 \quad (3.103)$$

La première étape de ce couplage consiste à s'assurer, dans chaque cellule du domaine de calcul, que les approches eulériennes et lagrangiennes transportent en moyenne la même quantité de fraction volumique de liquide ainsi qu'un diamètre moyen de Sauter équivalent. Dans le cas contraire un facteur correctif de masse est appliqué pour déterminer un nouveau nombre de gouttes par particule lagrangienne N^+ :

$$N^+ = \epsilon_n N \quad (3.104)$$

Ainsi qu'un facteur correctif pour le diamètre des particules lagrangiennes pour qu'elles aient un nouveau diamètre D_k^+ :

$$D^+ = \epsilon_d D \quad (3.105)$$

La figure 3.15 représente de façon schématique ces modifications au niveau de la distribution de taille des particules lagrangiennes. Le principe est d'égaliser les diamètres moyens de Sauter eulériens et lagrangiens. Une fois ces modifications faites, une nouvelle distribution de taille est obtenue. Elle peut être considérée comme une distribution de taille "hybride Euler - Lagrange", dans le sens où elle possède un certain nombre d'informations venant de l'approche lagrangienne (ecart-type autour du diamètre moyen de Sauter, forme générale de la distribution...) et elle possède le diamètre moyen de Sauter eulérien.

Il reste cependant à déterminer les coefficients multiplicatifs de masse et de taille de gouttes, respectivement ϵ_n et ϵ_d en s'assurant que la masse lagrangienne est égale à la masse eulérienne et en égalisant les diamètres moyens de Sauter eulérien et lagrangien, il vient :

$$\epsilon_n = \left(\frac{\alpha_l}{\alpha}\right)^2 \left(\frac{\Sigma}{\Sigma_l}\right)^3 \quad (3.106)$$

$$\epsilon_d = \left(\frac{\alpha}{\alpha_l}\right) \left(\frac{\Sigma_l}{\Sigma}\right) \quad (3.107)$$

La méthode permet d'assurer un comportement identique de la modélisation lagrangienne et de la modélisation eulérienne en zone diluée du spray. Dans la section suivante l'impact des particules lagrangiennes sur les champs eulériens sera présenté.

3.5.6 Couplage Lagrange -> Euler

L'intérêt d'un couplage Lagrange/Euler réside donc dans l'exploitation de la distribution de taille hybride Euler - Lagrange pour corriger la vitesse des équations de

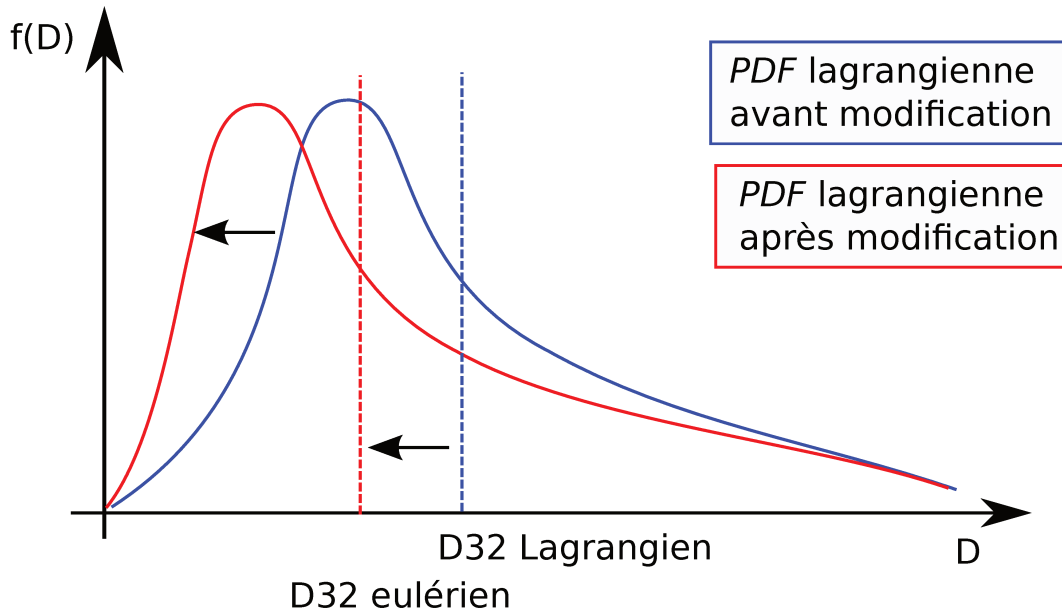


FIGURE 3.15 – Principe de modification des distributions de taille de particules lagrangiennes en prenant comme référence le diamètre moyen de Sauter eulérien pour reconstruire une nouvelle distribution de taille hybride Euler - Lagrange

transport eulériennes. En effet si on reprend l'équation de transport de la fraction volumique de liquide :

$$\frac{\partial \bar{\alpha}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_i \bar{\alpha}}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{\alpha i}}{\partial x_i} = 0 \quad (3.108)$$

La vitesse peut très bien être définie de façon eulérienne, mais aussi de façon lagrangienne. En effet, il est tout à fait possible de calculer dans chaque cellule du domaine les vitesses u_l^α et u_l^Σ qui correspondent aux moyennes des vitesses pondérées respectivement par le volume et par la surface de liquide :

$$u_l^\alpha = \frac{1}{\alpha_l} \sum_k u_l N_k \frac{\pi}{6} D_k^3 \quad (3.109)$$

$$u_l^\Sigma = \frac{1}{\Sigma_l} \sum_k u_l N_k \pi D_k^2 \quad (3.110)$$

avec α_l et Σ_l respectivement le volume total et la surface totale de liquide sous forme lagrangienne dans la cellule considérée.

Il reste donc à intégrer cette contribution lagrangienne dans l'évaluation de la vitesse. Le nombre de particules stochastiques en lagrangien n'est pas toujours suffisant pour assurer une convergence statistique. Il a donc été décidé d'introduire une fonction de pondération entre l'approche eulérienne et l'approche lagrangienne. Si la cellule considérée ne contient pas plus d'une particule lagrangienne, les vitesses retenues doivent être intégralement celles obtenues par le formalisme eulérien, sinon la valeur retenue entre les deux approches sera dicté par le nombre de particules stochastiques n_p présentes :

si $n_p < 2$ alors :

$$u^\alpha = u^E \quad (3.111)$$

$$u^\Sigma = u^E \quad (3.112)$$

sinon :

$$u^\alpha = \frac{1}{\sqrt{n_p}} u^E + \left(1 - \frac{1}{\sqrt{n_p}}\right) u_l^\alpha \quad (3.113)$$

$$u^\Sigma = \frac{1}{\sqrt{n_p}} u^E + \left(1 - \frac{1}{\sqrt{n_p}}\right) u_l^\Sigma \quad (3.114)$$

Cette fonction de pondération exprime le fait que l'erreur due à la convergence statistique est proportionnelle à $\frac{1}{\sqrt{n_p}}$. Par exemple, cette répartition des poids entre les deux formalismes implique qu'à partir de quatre particules dans une cellule, l'approche lagrangienne du modèle intervient à 50% dans le calcul de la vitesse u^α et u^Σ .

3.6 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons détaillé toutes les étapes du développement d'un modèle Eulérien/Lagrangien de simulation aux grandes échelles spécifiquement dédié à l'atomisation dans le cadre de maillage non structuré. Il permet d'extraire deux cas limites qui sont à la base de la modélisation proposée. Soit l'interface est bien décrite, alors dans ce cas une méthode de capture d'interface doit être utilisée. Soit elle ne l'est pas, il faut d'écrire les deux phases en termes de moyennes et l'approche homogène ELSA LES est utilisée. Le modèle cherche donc à joindre ces deux cas limites. Dans le modèle proposé, la transition se fait grâce à un coefficient défini localement. Suivant sa valeur on active ou non la méthode de capture d'interface. Pour être capable de définir ce coefficient, deux critères de transition ont été définis. Le premier se base sur la proportion de la densité d'interface résolue. Le modèle résout donc l'équation de transport

de la densité d'interface, qui nous permet de connaître la densité d'interface résolue. Le deuxième critère est lui basé sur la courbure de l'interface vis à vis de la résolution.

Une nouvelle approche pour le calcul de la vitesse intervenant dans les équations de transport de la fraction volumique de liquide et de la densité d'interface liquide/gaz est proposée. Elle se base sur une utilisation couplée des approches eulérienne et lagrangienne en zone diluée du jet. Dans chaque cellule, on s'assure de la bonne conservation de la masse de liquide et la surface liquide/gaz entre les approches Euler et Lagrange. L'approche lagrangienne permet d'obtenir une distribution de taille de gouttes liquides hybride Euler - Lagrange. La vitesse est ensuite reconstruite comme une fonction de la vitesse Eulérienne et de la vitesse Lagrangienne pour calculer les flux dans l'approches Eulérienne.

Dans le prochain chapitre les premiers résultats obtenus avec la modélisation proposée sont analysés sur des cas proches de l'injection Diesel.

Chapitre 4

Résultats du modèle LES d'atomisation

La modélisation proposée au chapitre précédent est testée dans ce chapitre. Notons qu'il est très difficile d'obtenir des données expérimentales en zone très proche de l'injecteur, cependant certaines méthodes y parviennent comme les méthodes LCV [110], d'imagerie ballistique [111] ou encore X-RAY [112, 113]. Aussi nous avons choisi d'utilisé un cas DNS comme référence. Il s'agira donc d'une validation de résultats avec une référence numérique optimale et non pas de validation expérimentale. On ajoute que, dans la mesure où les simulations présentées ici constituent les premières phases de développement d'un modèle, ces résultats vont nous permettre de mettre en lumière les problèmes rencontrés et si possible d'envisager des améliorations.

En introduction, on présente donc la configuration de calcul choisie pour tester cette modélisation. Dans une deuxième partie on étudie le comportement du solveur initial **interFoam**, en fonction de la résolution du maillage. Puis on étudie le comportement qualitatif du modèle développé dans le chapitre précédent et une attention particulière est portée sur les critères de transition. Ensuite on compare de manière quantitative les statistiques obtenues avec les différents formalismes. De plus on s'interroge sur la manière de comparer la DNS et la LES, constituant un point clef en modélisation.

4.1 Configuration numérique

Pour mener à bien des comparaisons a posteriori entre le modèle réalisé dans le chapitre précédent et une DNS, il est nécessaire de définir un cas test de référence.

La configuration géométrique du cas de référence est précisée sur la figure 4.1. On cherche à se rapprocher d'un cas Diesel qui puisse être simulé de manière très résolue (\approx DNS). Il s'agit d'une injection monotrou de diamètre $D_0 = 0.195mm$, le domaine de calcul est un parallélépipède rectangle, de dimensions $L_2 = L_3 = 0.55mm$ et $L_1 = 2.2mm$. Un système de coordonnées cartésiennes (x_1, x_2, x_3) est également défini, x_1 étant la direction axiale de l'écoulement alors que x_2 et x_3 sont les directions transverses.

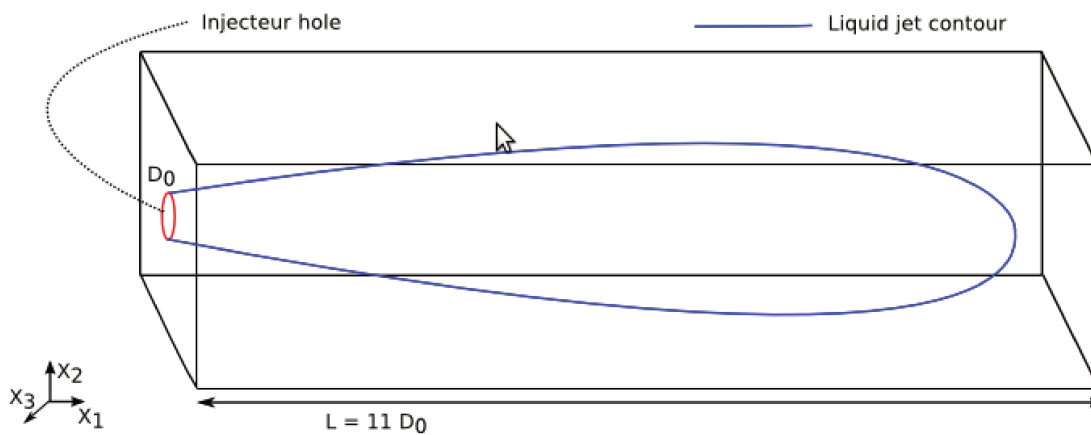


FIGURE 4.1 – Configuration géométrique du cas test de référence

Les fluctuations de turbulence sont imposées en entrée en utilisant la méthode développée par Klein [114] avec une échelle de corrélation caractéristique égale à un dixième du diamètre de l'injecteur et une intensité turbulente de 5%. Un résumé des paramètres physiques, pour cette configuration, peut être trouvé dans le tableau 4.2.

Afin de se rapprocher au maximum de caractéristiques expérimentales d'un jet diesel, on choisit la tension de surface $\sigma = 0.06N/m$ et la vitesse moyenne débitante du liquide égale à $250m.s^{-1}$.

Paramètre	Symbole/Unité	Valeur
Densité du gaz	$\rho_g(kg.m^{-3})$	1.226
Densité du liquide	$\rho_l(kg.m^{-3})$	821.8
Viscosité du gaz	$\mu_g(kg.m^{-1}.s^{-1})$	$1.78e^{-05}$
Viscosité du liquide	$\mu_l(kg.m^{-1}.s^{-1})$	$3.2e^{-03}$
Tension de surface	$\sigma(N.m^{-1})$	0.06
Diamètre d'injection	$D_0(\mu m)$	195
Vitesse moyen débitante	$u_d(m.s^{-1})$	250
Reynolds liquide	Re_l	12519
Weber liquide	We_l	106834
Intensité turbulente	$\overline{u'u'}/u^2$	0.05
Echelle de turbulence	$L_t(m)$	$0.1D_0$

TABLE 4.1 – Paramètres des simulations

Enfin les résultats sont comparés à un cas DNS de référence finement résolu (avec un maillage cartésien de $128^2 \times 1024$). Alors que les simulations via le solveur d'OpenFOAM sont réalisées avec un maillage "équivalent" à $64 \times 64 \times 512$. Les conditions limites d'OpenFOAM demandent de définir une condition limite pour l'injecteur, un maillage spécifique a donc été réalisé. Les figures 4.2 et 4.3 illustrent ce maillage spécifique. Sur la première figure apparait un plan transverse (axe x_2, x_3). On remarque que le coeur du jet possède des mailles régulières et rectangulaires. Plus on s'éloigne de l'axe plus la résolution du maillage diminue. L'accroissement du maillage au fur et à mesure que l'on s'éloigne de l'injecteur est nécessaire pour traiter les cas industriels. La deuxième figure est un plan axial du maillage (axe x_1, x_2), la longueur des mailles étant la même quelle que soit la position sur l'axe.

4.2 InterFoam Standard

Nous présentons les résultats de la configuration retenue ci-dessus via le solveur **interFoam** natif d'OpenFOAM version 2.3.0. Dans un premier temps nous exposons les limites de la méthode de compression d'interface d'OpenFOAM sur le champ de la fraction volumique de liquide. Puis nous étudions l'impact de la résolution du maillage sur la simulation. Et enfin nous comparons ces résultats avec ceux obtenus par le code ARCHER.

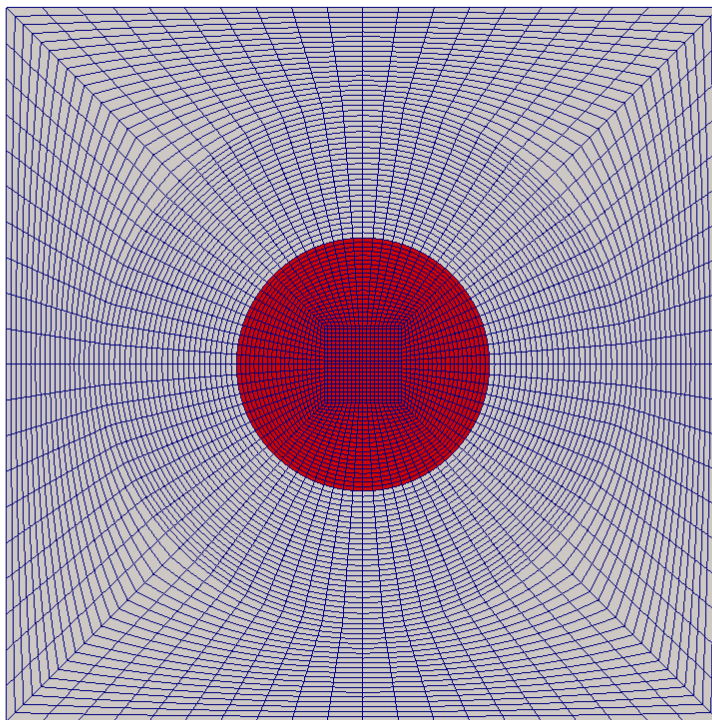


FIGURE 4.2 – Maillage de vue face : La zone d'injection du liquide est représentée en rouge

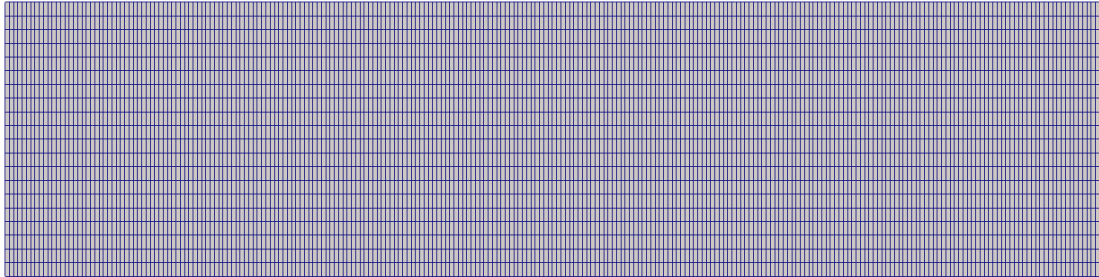


FIGURE 4.3 – Maillage de vue Profil

4.2.1 Fraction volumique de liquide

Cette section a pour but de présenter l'évolution temporelle du champ de fraction volumique de liquide résolu, α . La figure 4.4 présente ainsi les champs α de 5 temps de la simulation, du début de l'injection à $t = 2 \cdot 10^{-6} s$ au jet pleinement développé à $t = 1 \cdot 10^{-5} s$.

On remarque que la fraction volumique de liquide est diffuse autour de l'interface, ceci peut être dû au fait que toutes les échelles de celles-ci ne sont pas résolues. D'un point de vue méthode cela signifie que la méthode de compression ne permet pas de conserver une interface définie à l'échelle d'une maille. C'est un indicateur montrant que les plus petites structures ne peuvent pas être résolues à l'échelle du maillage avec la méthode proposée. Il serait sans doute possible de forcer la compression en augmentant la vitesse de compression. On pourrait obtenir une interface résolue mais cela ne correspond pas à l'écoulement réel. Cela revient à forcer numériquement la stabilité à l'échelle du maillage, ce qui est aussi le cas avec les méthodes VOF, LevelSet etc... Il semble intéressant de plutôt représenter les plissements de sous maille par des modèles physiques appropriés. Cette diffusion traduit la présence de gouttes ou de structures de sous maille d'un côté de l'interface (de l'interface résolue vers le gaz) et la présence d'inclusions gazeuses du côté liquide.

A partir des temps de simulation $t = 6 \cdot 10^{-6} s$ figure 4.4, les structures ne peuvent plus être résolues explicitement par le maillage. La fraction volumique de liquide commence à être transférée en sous-maille numériquement. Dans ce cas l'isocontour 0.5 de la fraction volumique de liquide ne permet de plus de représenter correctement l'interface liquide/gaz théorique. Certaines structures résolues qui correspondent à

l'interface (symbolisée en noir) disparaissent alors.

Malgré le terme de compression dans l'équation de transport de la fraction volumique de liquide, le solveur **interFOAM** n'est pas en mesure de capturer toutes les échelles de l'écoulement. Certaines structures liquides deviennent trop petites pour être suivies de manière classique. Il est alors nécessaire de passer à une représentation de sous maille.

4.2.2 Impact de la résolution du maillage

Dans cette section l'impact de la résolution du maillage est étudié toujours avec le solveur **interFOAM**. Pour ce faire, deux simulations DNSI ont été réalisées. La première simulation utilise le maillage défini dans la section 4.1. La deuxième simulation utilise un maillage deux fois plus raffiné suivant chacune des directions.

Sur la figure 4.5 nous présentons l'isocontour 0.5 de la fraction volumique de liquide au temps $t = 1.5 \cdot 10^{-5} s$ pour les deux simulations. Le jet de gauche correspond à la simulation la moins résolue alors que le jet de droite est la simulation la plus résolue. Lorsque la taille de la maille de calcul diminue, on observe trois points :

- La taille minimale des structures résolues diminue. En fait, celle-ci est de l'ordre de Δx , la taille d'une cellule de calcul. Le maillage influence cet effet de façon significative, on remarque également que les structures sont de plus en plus nombreuses.
- La rupture de la colonne liquide se fait plus proche de l'injecteur.
- La dispersion du liquide le long de l'axe d'injection est un peu plus importante.

La résolution du maillage a donc un rôle direct important, puisque le fait de ne pas capturer les plus petites structures a un impact sur les plus grandes structures à l'instar de la dispersion du liquide. Or comme nous l'avons vu dans la section précédente la méthode de suivi d'interface native d'**OpenFOAM** ne permet pas de capturer les structures sous résolues. Puisque nous ne pouvons pas nous assurer de résoudre toutes les échelles de l'interface, il est nécessaire de mettre en place une méthodologie pour prendre en compte ces phénomènes sous-résolus.

4.2.3 Méthode Compressive (InterFOAM) vs Méthode CLSVOF (ARCHER)

Dans cette section nous comparons graphiquement les sprays réalisés avec la configuration numérique du tableau 4.1 via le solveur **interFoam** d'OpenFOAM et via le code ARCHER. Les deux simulations sont réalisées avec des maillages équivalents ($128 \times 128 \times 512$).

Le jet de gauche de la figure 4.6, a été réalisé avec **interFoam**, l'interface est représentée via l'isosurface 0.5 de la fraction volumique de liquide. Le jet de droite a lui été réalisé via le code ARCHER, l'interface est obtenue grâce au niveau 0 de la LevelSet. Dans les deux cas les simulations sont présentées au temps $t = 1.5 \cdot 10^{-5} s$.

Nous observons des différences notables entre les deux simulations. En effet nous remarquons que les tailles et l'orientation des ligaments formés par les deux jets sont différents. Dans le cas d'InterFOAM les plissements de l'interface sont parallèles à l'entrée de l'injecteur, alors que dans le cas d'ARCHER ils sont parallèles à l'axe d'injection. De plus la dispersion du liquide le long de l'axe d'injection est un peu plus importante via le code ARCHER que via le solveur d'OpenFOAM. En effet sur le jet de droite on distingue des petites gouttes dispersées alors que sur le jet de gauche les gouttes restent groupées le long de l'axe.

Ces différences sont dues au fait que les deux codes n'utilisent pas les mêmes méthodes de résolution numérique. Le code ARCHER est dédié à l'étude du phénomène d'atomisation, il possède de ce fait des méthodes numériques plus précises. Comme sa méthode de suivi d'interface pour capturer l'interface ou la méthode *gostfluide* pour gérer les discontinuités à l'interface. Cependant ces méthodes empêchent le passage en sous-maille. ARCHER utilise aussi des schémas d'ordre plus élevé, WENO d'ordre 5 spatialement et un Range Kutta d'ordre 3 temporellement alors que OpenFOAM utilise au maximum des schémas d'ordre 2.

4.3 Modèle de sous maille pour les structures liquides

On présente maintenant les résultats obtenus par le modèle de changement de formalisme développé dans le chapitre précédent 3.4. Dans un premier temps nous réalisons des tests numériques afin de nous assurer de la stabilité du modèle. Puis dans un second temps nous cherchons à définir les valeurs seuils des critères de transition. En-

suite dans un troisième temps nous vérifions si le comportement qualitatif du modèle correspond à nos attentes. Enfin nous comparons les résultats via notre modèle à ceux obtenus via une DNS de référence.

4.3.1 Test numérique

Dans cette section quelques tests numériques sont réalisés sur la méthode développée dans le chapitre précédent afin de s'assurer que la méthode est stable. Des simulations numériques avec pour critères de transitions des critères temporels et spatiaux ont été effectuées. Ces tests vont permettre de savoir si le code OpenFOAM représente correctement les changements de formalisme induits par la méthode développée dans le chapitre précédent.

Dans un premier temps une simulation utilisant un critère de transition temporel a été réalisée figure 4.7. Le principe est le suivant : jusqu'à $t = 5 \cdot 10^{-6}s$, le formalisme DNSI qui utilise la méthode de suivi d'interface et dont l'équation de transport de la fraction volumique contient toujours un terme compressif. Ensuite le formalisme LES prend le relais, le terme compressif disparaît de l'équation pour laisser place à un terme de sous-maille. Cette configuration a été réalisée sans aucun problème malgré le brusque changement de formalisme au cours du temps. Sur la figure 4.7 nous observons les résultats de cette simulation au temps $t = 2 \cdot 10^{-6}s$, $t = 6 \cdot 10^{-6}s$ et $t = 1 \cdot 10^{-5}s$. La première image correspond donc au formalisme DNSI, la deuxième au formalisme LES peu de temps après l'instant transition et enfin la dernière au formalisme LES établi. Comme attendu au début de la simulation le formalisme DNS, raidit l'interface et minimise la diffusion numérique. Puis après la transition, les termes de sous-maille influencent la simulation et l'interface devient plus diffuse selon le modèle LES.

Un second test a été effectué en utilisant comme critère de transition, un critère spatial. Une moitié du jet (partie haute) est résolue via l'équation de transport de la fraction volumique de liquide compressive alors que l'autre moitié (partie basse) est résolue via l'équation de transport filtrée LES. Les résultats de cette configuration sont observables sur la figure 4.8, au temps $t = 2 \cdot 10^{-6}s$, $t = 6 \cdot 10^{-6}s$ et $t = 1 \cdot 10^{-5}s$. Pour les 3 instants, l'interface est diffuse dans la partie basse du spray alors que la partie haute l'interface est maintenue résolue à l'échelle de la maille. Le changement de formalisme ne pose aucun problème numérique au code de calcul, en effet celui reste stable malgré le changement soudain de méthode de résolution.

Ces tests nous confortent vis à vis de la capacité du code à effectuer le changement de formalisme dans nos simulations et sur l'effet du modèle de sous-maille au delà de la diffusion numérique.

4.3.2 Détermination des critères de transition

Nous avons réalisé diverses simulations en faisant varier les valeurs des critères de transitions afin de mesurer leurs impacts et de déterminer leurs valeurs seuils. Les deux critères de transition IRQ_{Σ} et IRQ_k ne définissent pas les mêmes zones sous résolues. Nous avons ainsi pu les traiter séparément.

Dans un premier temps nous nous sommes focalisés sur le critère IRQ_{Σ} . Pour rappel il est défini par :

$$IRQ_{\Sigma} = \frac{\text{interface résolue}}{\text{interface totale}} = \frac{\bar{\Sigma}_{min}}{\bar{\Sigma}} \quad (4.1)$$

Pour définir la valeur seuil de IRQ_{Σ} , nous avons fait varier la valeur de critère sur l'isosurface 0.5 de la fraction volumique de liquide d'une simulation de spray. Les résultats sont observables sur la figure 4.9. La valeur du critère varie de 0.5 à 0.9 en passant par 0.7. Notons qu'il arrive au début de l'injection que l'interface soit considéré comme sous-résolue : ceci est dû au très fort cisaillement de vitesse. Plus l'interface est loin de l'injecteur, moins nous trouvons de zones sous résolues. Nous remarquons aussi que plus le critère est faible, plus l'interface est considérée comme résolue. Avec les valeurs seuils 0.5 et 0.7 très peu de plissements de l'interface sont considérés comme sous résolus. La valeur 0.9 est retenue pour la suite de ces travaux.

Nous avons également fait varier la valeur de critère sur un plan de coupe et nous avons analysé les zones où les termes de sous-maillages s'activaient. Sur la figure 4.10 nous pouvons observer le résultat de 3 simulations numériques de spray avec un critère IRQ_{Σ} variant de 0.65 à 0.9. En blanc sont représentées les zones où les termes de sous-maillages sont actifs. Plus le critère est proche de 1, plus le nombre de mailles de calcul contenant des termes de sous-maillages est important. Lorsque le critère IRQ_{Σ} vaut 0.65 et 0.75 on s'aperçoit que certaines zones diluées, c'est à dire où la fraction volumique de liquide est inférieure à 0.5, ne sont pas marquées comme étant des zones LES. Ce n'est pas le cas lorsque le critère de transition IRQ_{Σ} vaut 0.9. Ainsi la valeur seuil pour le critère de transition IRQ_{Σ} sera fixé 0.9. Cela signifie que l'interface est sous résolue dès que 10% de celle ci n'est pas capturée par le maillage.

Puis nous nous sommes intéressés au critère de courbure IRQ_k défini comme :

$$IRQ_k = \frac{1}{\Delta k} = \frac{R}{2\Delta} \quad (4.2)$$

Comme pour le critère IRQ_Σ plusieurs simulations 4.11 ont été réalisées en faisant varier la valeur de critère de 0.5 à 1.5. Les mailles de calcul où la LES est active sont encore représentées en blanc. Plus le critère est grand, plus le nombre de mailles de calcul contenant des termes de sous-mailles est important. Notons que les mailles de calcul activées via ce critère sont très différentes des mailles activées via le critère IRQ_Σ . Le critère IRQ_Σ permet de détecter les zones diluées, c'est à dire les zones où l'échelle de plissement de l'interface est plus petite que la maille de calcul. Alors que le critère IRQ_k doit lui nous permettre de capturer les courbures de l'interface. Nous nous intéressons donc plus particulièrement à l'influence de sous critères sur la courbure de l'interface au niveau du coeur liquide. Dans le cas $IRQ_k = 0.5$ on note que certaines mailles de calculs au niveau d'un plissement de l'interface ne sont pas capturées. Dans le cas 1.5, c'est l'inverse : trop de mailles n'interagissant pas avec les plissements ou avec les zones diluées sont capturées. Ainsi nous avons fixé la valeur seuil pour le critère de transition IRQ_k à 1.

4.3.3 Comportement du modèle

On s'intéresse dans cette section au comportement qualitatif du modèle. Pour cela on observera les champs instantanés de fraction volumique de liquide α , de la densité d'interface, $\bar{\Sigma}$, et du diamètre moyen de Sauter D_{32} .

Nous présentons l'évolution temporelle de la fraction volumique de liquide, de la densité d'interface et du diamètre de Sauter obtenu par le le modèle LES. Les figures 4.12, 4.13 et 4.14 présentent ainsi les champs α , $\bar{\Sigma}$ et D_{32} de 5 pas de temps, du début de l'injection à $t = 2 \cdot 10^{-6}s$ au jet pleinement développé à $t = 1 \cdot 10^{-5}s$

Comme pour les simulations réalisées via le solveur **interFoam** la fraction volumique de liquide est diffuse autour de l'interface près de l'injecteur. Ceci est dû au fait que toutes les échelles de celles-ci ne sont pas résolues et cette diffusion traduit la présence de gouttes ou de structures de sous maille d'un coté de l'interface (de l'interface résolue vers le gaz) et la présence d'inclusions gazeuses du coté opposé.

A partir de $t = 6 \cdot 10^{-6}s$ figure 4.12, les structures liquides ne peuvent plus être résolues explicitement par le maillage LES et la fraction de volume liquide commence

à être transférée en sous maille. A mesure que le jet liquide avance dans le domaine de calcul, les structures résolues qui correspondent à l'interface (symbolisées en noir) disparaissent au profit du spray de sous maille.

De la même manière que pour la section précédente on trace les champs de densité d'interface, Σ , figure 4.13, aux mêmes instants t , que pour la figure 4.12. On peut observer sur cette figure que la densité d'interface est produite dès le début de l'injection proche du nez de l'injecteur, là où le cisaillement de vitesse est maximal.

Notons qu'au niveau de l'isocontour 0.5 de la fraction volumique de liquide (trait noir), la densité interfaciale est toujours importante. A la fin du domaine de calcul, sur la figure 4.13, il est possible d'observer que les zones où la densité d'interface est importante, correspondent aux zones où les structures liquides ne sont plus entièrement résolues.

Connaissant les champs de fraction de volume liquide résolus, α et celui de la densité d'aire interfaciale, il est possible d'obtenir, le diamètre de Sauter au sein de chaque maille de calcul LES, que l'on notera D_{32} . On l'exprime de la manière suivante :

$$D_{32} = \frac{6\alpha}{\Sigma} \quad (4.3)$$

Notons que l'expression ci dessus considère le cas de gouttes dans un environnement gazeux. En outre, pour une fraction volumique de liquide α supérieur à 0.5, il est difficile de considérer que cette grandeur correspond à un diamètre de goutte. Dans ce cas, le D_{32} correspond au diamètre des bulles dans un milieu liquide. Entre les milieux dilué $0.5 < \alpha < 0.9$, elle correspond à une échelle de plissement de l'interface.

La figure 4.14 montre l'évolution de cette quantité lors du développement du jet. Il est visible que des structures de petites dimensions sont produites dès le début de l'injection, autour de l'interface. Précisons que ces structures ne sont pas forcément des paquets liquides qui se détachent, mais il peut simplement s'agir de plissements de l'interface. La présence de ces structures est détectée tout au long du développement du jet dans la région proche du nez de l'injecteur.

Plus loin, sur la figure 4.14, il est possible d'observer que peu de structures résolues atteignent la fin du domaine de calcul. Néanmoins, dans cette zone, la quantité D_{32} diminue, ce qui signifie que le spray continue à se fragmenter sous l'effet des interactions

de sous maille du spray.

Au final, sur tous ces champs, le diamètre de Sauter est de l'ordre du μm ce qui est compatible avec les tailles de gouttes que l'on peut relever expérimentalement pour ce type d'injection.

4.3.4 Vitesse interfaciale dans un spray Diesel

La première simulation d'un processus d'atomisation avec le code ARCHER a été réalisée par Ménard et al [4]. Cette simulation de spray Diesel a mis en évidence les qualités de conservation de la masse du couplage CLSVOF. De plus, l'analyse qualitative montre la capacité du code à reproduire la richesse des processus d'atomisation tels que la création de ligaments et la fragmentation en plusieurs gouttes, ainsi que des collisions et coalescences de gouttes... Cependant des comparaisons quantitatives avec l'expérience étaient indisponibles dans une telle configuration. La configuration a été choisie pour se rapprocher au mieux des conditions réelles. De plus une contrepression est supposée dans le gaz pour simuler les condition moteurs. Cela ce traduit par un faible rapport de masses volumiques liquide/gaz. Mais dans ces conditions, les techniques expérimentales sont plus difficiles à mettre en oeuvre que dans des conditions à pression atmosphérique.

Une de ces techniques expérimentales est l'imagerie balistique. Développée dans le cadre de la thèse de Saïd Idlahcen [111], elle est une avancée importante dans l'étude expérimentale des sprays Diesel au laboratoire. Cette technique permet d'obtenir des images figées 2D du spray en proche sortie de l'injecteur et très rapprochées en temps (200 ns). L'extraction d'informations quantitatives (vitesse d'interface, complexité de l'interface) à partir de ces images nécessite des traitements particuliers : c'est l'objectif de la thèse de Kamel Lounnaci [115]. Ces nouvelles informations permettent d'envisager une comparaison de données quantitatives entre les résultats numériques et expérimentaux dans une configuration à pression atmosphérique. Dans ce contexte des simulations ont été réalisées avec le code OpenFOAM et notre formalisme. Ce test a mis en évidence certains comportement instables de la simulation quand le rapport de masse volumique liquide-gaz devenait important. Aussi G. Vaudor [116] dans sa thèse a développé et mis en oeuvre une méthode renforçant le couplage entre les flux de masse et de quantité de mouvement au travers de l'interface. Ceci a permis une nette amélioration des comparaisons avec l'expérience pour le code ARCHER. Dans le solveur InterFOAM les flux de masse sont directement utilisés pour construire les flux

de quantité de mouvement ce qui est une autre façon de résoudre le problème.

Dans un premier temps, nous présentons les configurations expérimentale et numérique. Numériquement, différentes précautions ont été prises pour se rapprocher au plus près des conditions expérimentales. Dans la seconde partie, nous présentons une comparaison des vitesses du liquide obtenues expérimentalement par rapport à celle obtenues avec les trois simulations (OpenFoam, Archer standart, New Archer).

4.3.4.a Configurations expérimentales et numériques

L'injecteur utilisé dans l'étude expérimentale est présenté sur la figure 4.15. La géométrie de l'injecteur choisi pour ces comparaisons est simple dans la mesure où celui-ci est monotrou et axisymétrique. Le diamètre de sortie de la buse mesure $195\mu m$.

Le fluide utilisé lors des expériences est le Shell NormaFluid ISO 4113 dont les propriétés, semblables au Diesel liquide, sont :

Paramètre	Symbole/Unité	Valeur
Densité du liquide	$\rho_l(kg.m^{-3})$	803
Viscosité du liquide	$\mu_l(kg.m^{-1}.s^{-1})$	$3.2e^{-03}$
Tension de surface	$\sigma(N.m^{-1})$	$2.547e^{-02}$

TABLE 4.2 – Paramètres des simulations

Expérimentalement, il est impossible d'avoir accès aux champs de vitesse en sortie de l'injecteur. Afin de se rapprocher le plus fidèlement possible des conditions expérimentales, la solution consiste à simuler l'écoulement en amont de la sortie de l'injecteur. Kamel Lounnaci a reproduit la géométrie de l'injecteur avec le mailleur Gambit. La simulation dans l'injecteur est ensuite réalisée avec le logiciel Fluent avec la méthode (RNG) $k-\epsilon$. La méthode développée par Klein et al [114] est ensuite utilisée dans ARCHER pour introduire l'échelle de longueur et l'intensité de la turbulence moyenne extraites de ces calculs (respectivement 8% du diamètre et 5% de la vitesse d'injection). Les profils de vitesses (figure 4.16) obtenus sont injectés en paramètres d'entrée de la simulation de l'écoulement externe réalisée avec le solveur ARCHER et dans le solveur d'OpenFOAM.

La simulation de l'écoulement externe est réalisée avec les propriétés physiques du NormaFluid pour le liquide et les propriétés standard de l'air à $25^\circ C$ et dans l'atmosphère pour le gaz ambiant. La grille de calcul est de $256 \times 256 \times 1024$ pour une taille de maille de $3 \mu m$ pour le calcul avec l'ancienne méthode avec le code ARCHER, et

$256 \times 256 \times 512$ pour une taille de maille de $4 \mu m$ pour la méthode une grille développé par G. Vaudor et $128 \times 128 \times 256$ pour une taille de maille variant de $10 \mu m$ à $30 \mu m$ pour la méthode OpenFOAM.

La vitesse interfaciale sera étudiée pour différents profils radiaux en $x = 500 \mu m, 750 \mu m, 1500 \mu m, 2000 \mu m$ comme l'illustre la figure 4.17.

4.3.4.b Comparaison entre la vitesse expérimentale et numérique

Nous allons nous intéresser plus particulièrement à la vitesse de l'interface, que ce soit du coeur liquide ou des gouttes. Expérimentalement, la vitesse à l'interface est obtenue par traitement de deux images successives (espacées de $261 ns$). Une méthode par corrélation permet d'estimer le déplacement d'une structure d'une image à l'autre, connaissant le déplacement et le temps entre les deux images. L'étude statistique porte sur 250 couples d'images où chaque couple provient d'une injection différente.

Numériquement, la distinction gouttes / coeur liquide n'a été effectuée que pour la simulation avec l'ancienne méthode d'ARCHER. L'extraction de la vitesse est obtenue directement des données de simulation en 3D, où une "mesure" de vitesse est effectuée lorsqu'une maille contient une interface.

Avec le code OpenFOAM et la méthode ELSA-LES, la notion même d'interface disparaît dans les régions où les termes de sous-mailles sont actifs. En effet dans ces zones, l'interface n'est plus suffisamment résolue pour être capturée. Nous avons alors défini une vitesse interfaciale comme étant la vitesse dans chaque maille de calcul pondéré par la densité interfaciale de la maille.

$$u_{\Gamma} = \frac{\langle u \bar{\Sigma} \rangle}{\langle \bar{\Sigma} \rangle} \quad (4.4)$$

Avec $\langle \rangle$ la moyenne temporelle. Sur la figure 4.18 on observe l'évolution de cette vitesse interfaciale en fonction de la distance radiale pour les quatre profils radiaux $500 \mu m$ (haut à gauche), $750 \mu m$ (haut à droite), $1500 \mu m$ (bas à gauche), $2000 \mu m$ (bas à droite). Les résultats expérimentaux sont représentés en traits pointillés noirs, alors que les résultats obtenus via notre méthode sont en violet. Notons qu'il y a aussi deux versions des résultats du code ARCHER, en trait plein noir la version de 2007 durant la thèse de Thibaut Ménard [1] (DNS), et la version plus récente développée par Geoffroy

Vaudor (NewDNS) [116].

Pour les quatre profils de vitesse, près de l'axe de l'injecteur nous obtenons des résultats similaires à ceux obtenus via la nouvelle version du code ARCHER. Cependant lorsque nous nous éloignons de l'axe, notre vitesse interfaciale chute, alors que la vitesse interfaciale du code ARCHER concorde avec les résultats obtenus via l'expérience. Il semble donc que la manière utilisée pour reconstruire la vitesse interfaciale dans l'approche LES ne permet pas de retrouver la vitesse réelle dès que la fraction volumique de liquide diminue. Tout d'abord notons que pour de fortes valeurs de fraction volumique de liquide la vitesse d'interface doit être très proche de la vitesse moyenne de l'écoulement (pondère ou non par la densité d'interface). Quand la fraction volumique d'air devient importante, les éléments de liquide peuvent avoir une vitesse différente de celle du gaz : c'est le phénomène de glissement. La vitesse moyenne interfaciale devrait être : $\langle u\delta_s \rangle$ alors que nous l'avons approchée par $\langle u\bar{\Sigma} \rangle$. Il faudrait avoir une meilleure idée du glissement, ce qui pourrait être fait en utilisant les approches aux second d'ordre [117].

4.4 Couplage Euler-Lagrange

Dans cette section nous présentons les résultats des simulations réalisées avec le couplage Eulérien/Lagrangien introduit dans le chapitre précédent. L'intérêt de ce couplage réside donc une meilleure représentation de la distribution de taille et la vitesse du spray quand celui-ci est formé. Ainsi l'approche hybride Euler - Lagrange peut être utilisée pour corriger les équations de transport eulériennes.

Il s'agit donc ici de tester l'influence de cette méthode de couplage sur le développement d'un spray Diesel dans une chambre de combustion. Pour cela, un calcul est effectué avec la version de référence, notre méthode permettant le changement de formalisme localement.

Afin de mettre en évidence les différences obtenues entre l'approche eulérienne et l'approche hybride Euler - Lagrange, l'évolution temporelle de l'isosurface $\alpha = 0.5$ de la fraction volumique de liquide et le diamètre des particules sont présentés sur la figure 4.19. Cette planches présentent le calcul obtenu avec l'approche hybride pour un critère de transition pris à 1% de fraction volumique de liquide. Seul 10000 particules lagrangiennes sont représentées pour ne pas surcharger les images, alors qu'au temps

$t = 1 \cdot 10^{-5}$ s plus de 100000 particules sont générées.

Il est possible d'augmenter le nombre de particules créées à chaque pas de temps, dans chaque cellule, afin de converger statistiquement et d'obtenir un champ de fraction volumique de liquide moins bruité mais des aspects numériques tels que l'allocation mémoire et le temps de calcul deviendraient inadaptés en vue d'une utilisation du modèle dans un contexte industriel.

4.5 Conclusion

Ce chapitre avait pour but d'évaluer le modèle LES d'atomisation sur un cas proche de l'injection Diesel. Considérant le manque de données expérimentales dans la zone située près du nez de l'injecteur, une simulation de référence (code ARCHER) a été utilisée à des fins de comparaison. Une comparaison avec une simulation obtenue avec le solveur InterFOAM d'OpenFOAM, dans les mêmes conditions, a également été proposée.

Dans un premier temps, une étude montre les limites du solveur natif d'OpenFOAM afin de simuler le phénomène d'atomisation. Une étude qualitative sur la fraction volumique de liquide et sur la résolution du maillage a été réalisée. Puis une comparaison sur l'interface liquide/gaz entre le solveur InterFOAM et un solveur CLSVOF de référence a été réalisée.

Dans un deuxième temps, la stabilité numérique du modèle LES d'atomisation a été montrée. Les valeurs seuils pour les deux critères de transition ont été définis. Puis une étude qualitative montre que le modèle répond bien aux attentes formulées au sein du chapitre précédent, lors de son développement, à savoir, que la prise en compte du terme de sous maille de la fraction de volume permet de passer de la vision résolue de l'interface au spray de sous maille.

On a pu comparer deux approches pour le suivi d'interface, l'approche correctrice du gradient de fraction volumique de liquide dans le solveur InterFOAM et l'approche CLSVOF dans le code ARCHER. L'approche CLSVOF permet de maintenir complètement le spray à l'échelle résolue, empêchant de fait l'atomisation au deçà de la maille de calcul pour les simulations sous-résolues. L'approche d'InterFOAM montre une dispersion du liquide pour les simulations sous résolue. Cette dispersion numérique peut

être contrôlée via les critères de transition et modélisée physiquement grâce à l'approche ELSA-LES développée durant cette thèse. L'application de ces approches à un cas à fort rapport de masse volumique liquide gaz a montré du point de vue l'approche CLSVOF la nécessité de bien prendre en compte de façon semblable les flux de masse et de quantité de mouvement. L'approche ELSA-LES introduite dans le cadre du solveur InterFOAM respecte le lien entre le flux de masse et le flux de quantité de mouvement. Cependant il paraît difficile en l'état de récupérer la vitesse interfaciale expérimentale pour les faibles fractions volumiques de liquides, c'est à dire quand le glissement est important. Pour améliorer ce point on peut avoir une modélisation Eulerienne du jet et introduire des particules Lagrangiennes mieux à même de représenter le glissement.

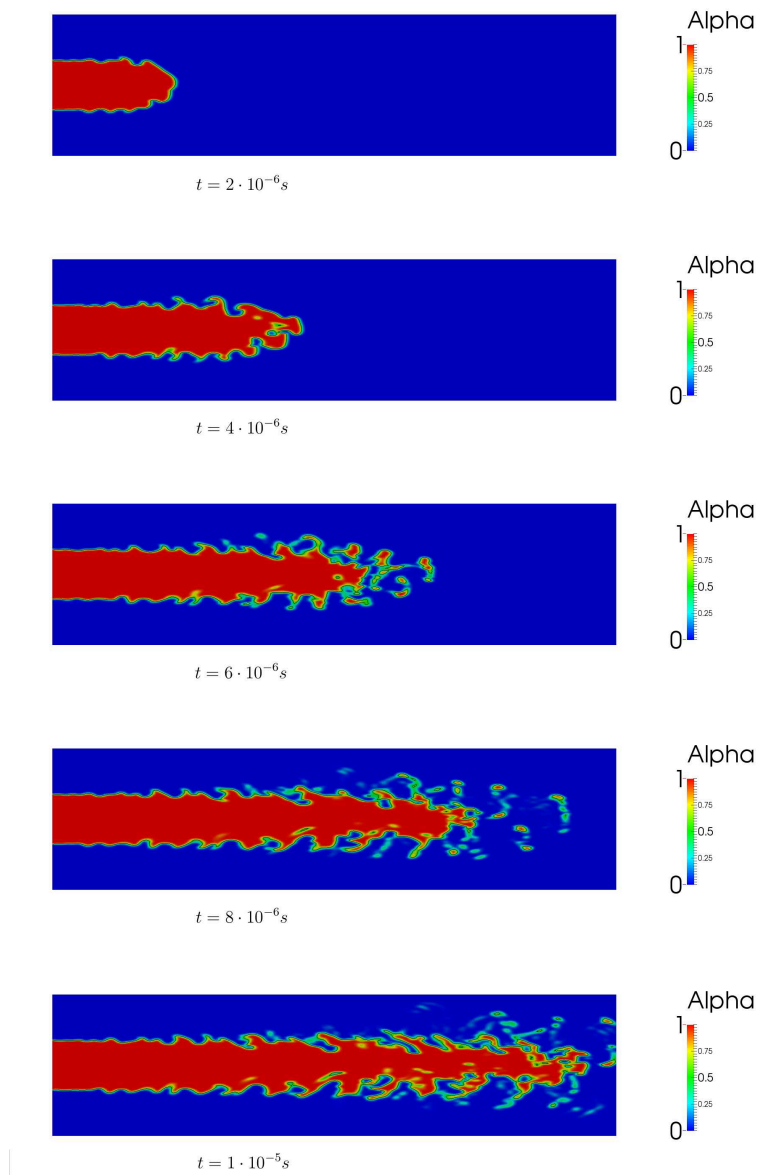


FIGURE 4.4 – Évolution temporelle de la fraction volumique de liquide α via le solveur interFoam

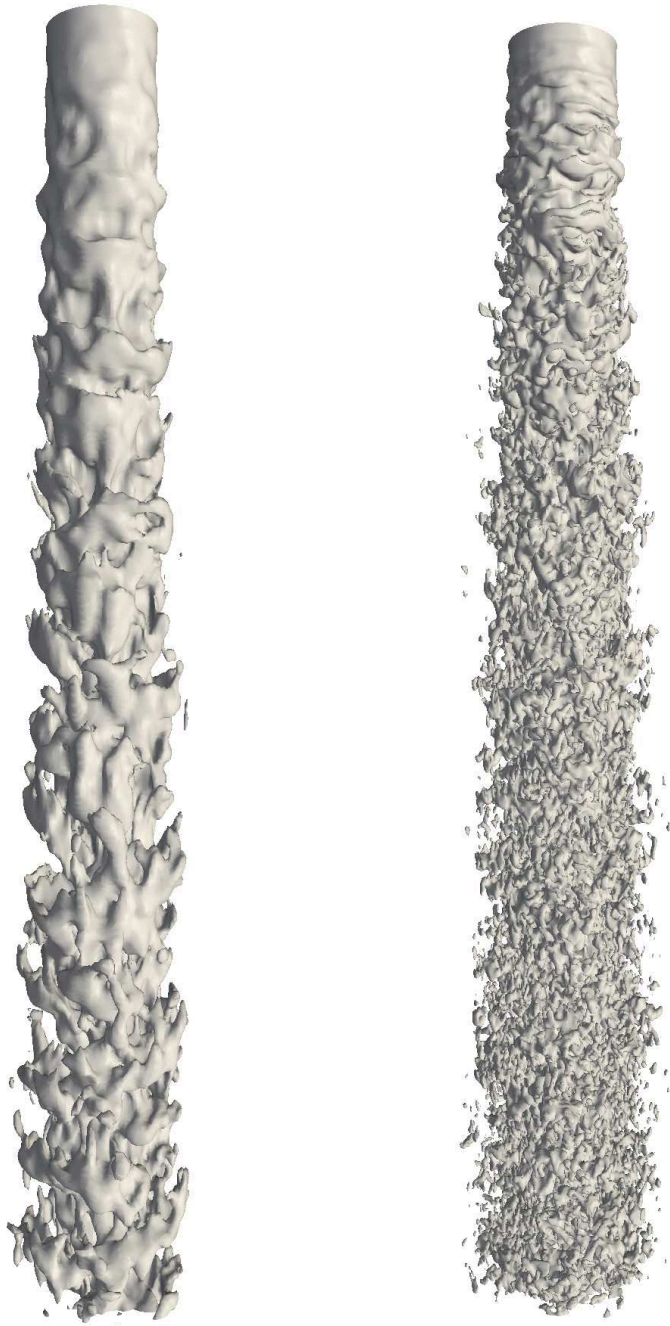


FIGURE 4.5 – Comparaison de jet obtenu sur différents maillages via le solveur Inter-FOAM : équivalent $64^2 \times 256$ à gauche et un équivalent à $128^2 \times 512$ à droite

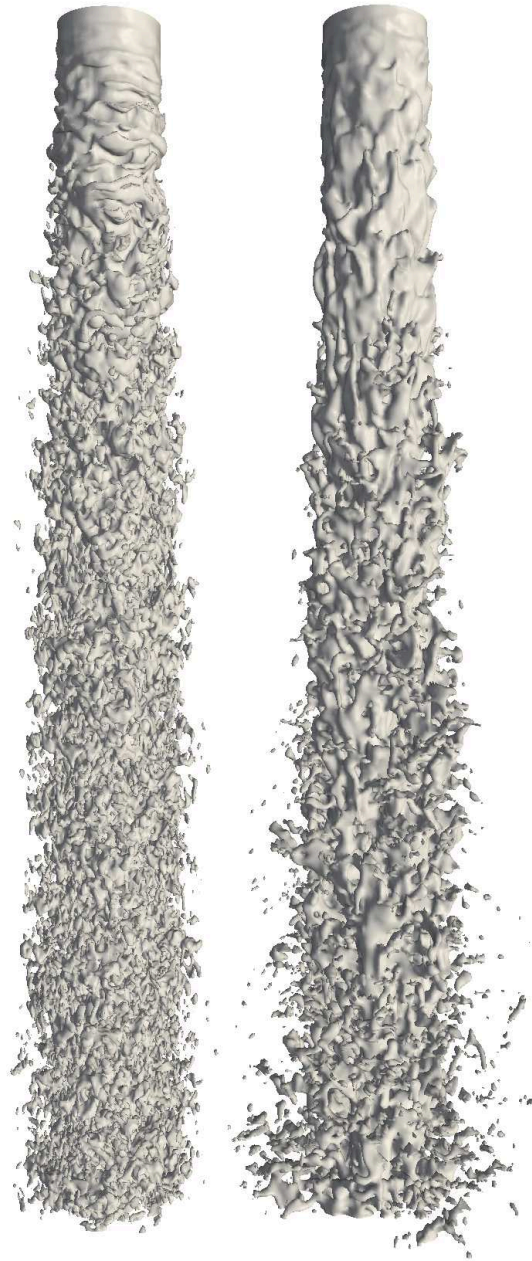


FIGURE 4.6 – Comparaison de jet obtenu via différentes méthodes sur un maillage équivalent : InterFOAM (gauche) et ARCHER (droite)

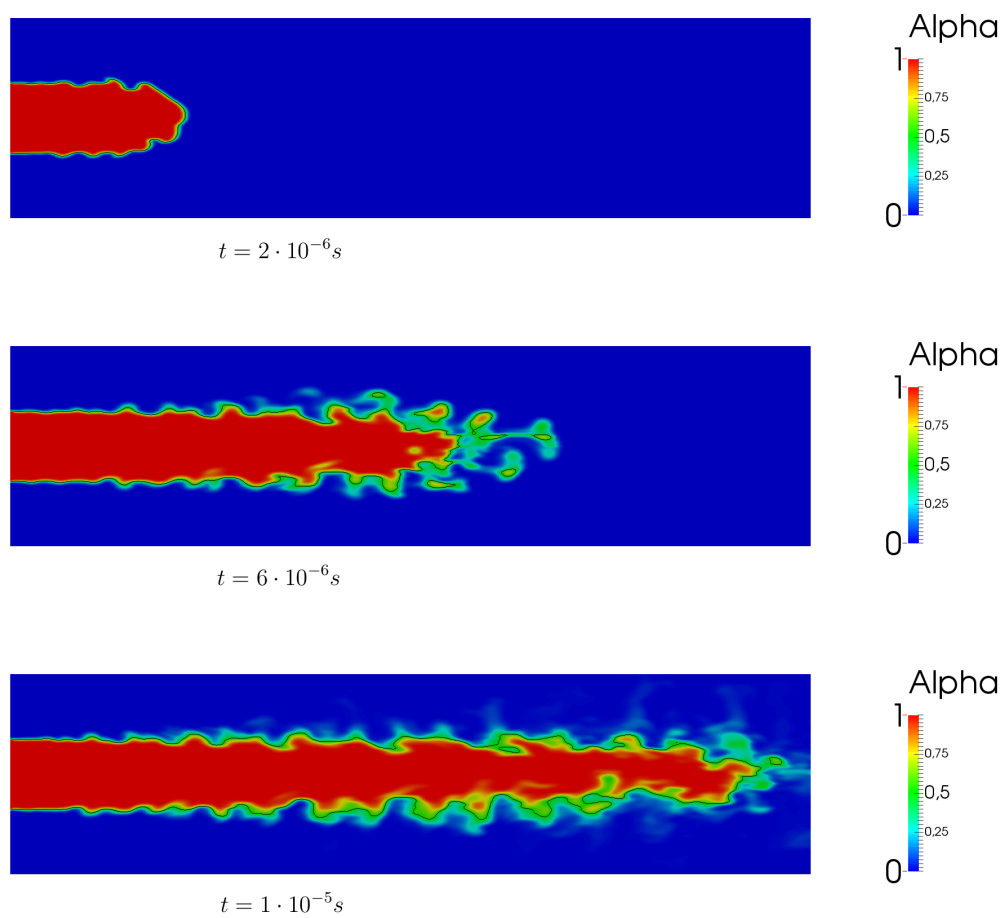


FIGURE 4.7 – Évolution temporelle d'un jet en utilisant dans premier temps une méthode de suivi d'interface compressive puis dans un second temps , des termes de sous maille.

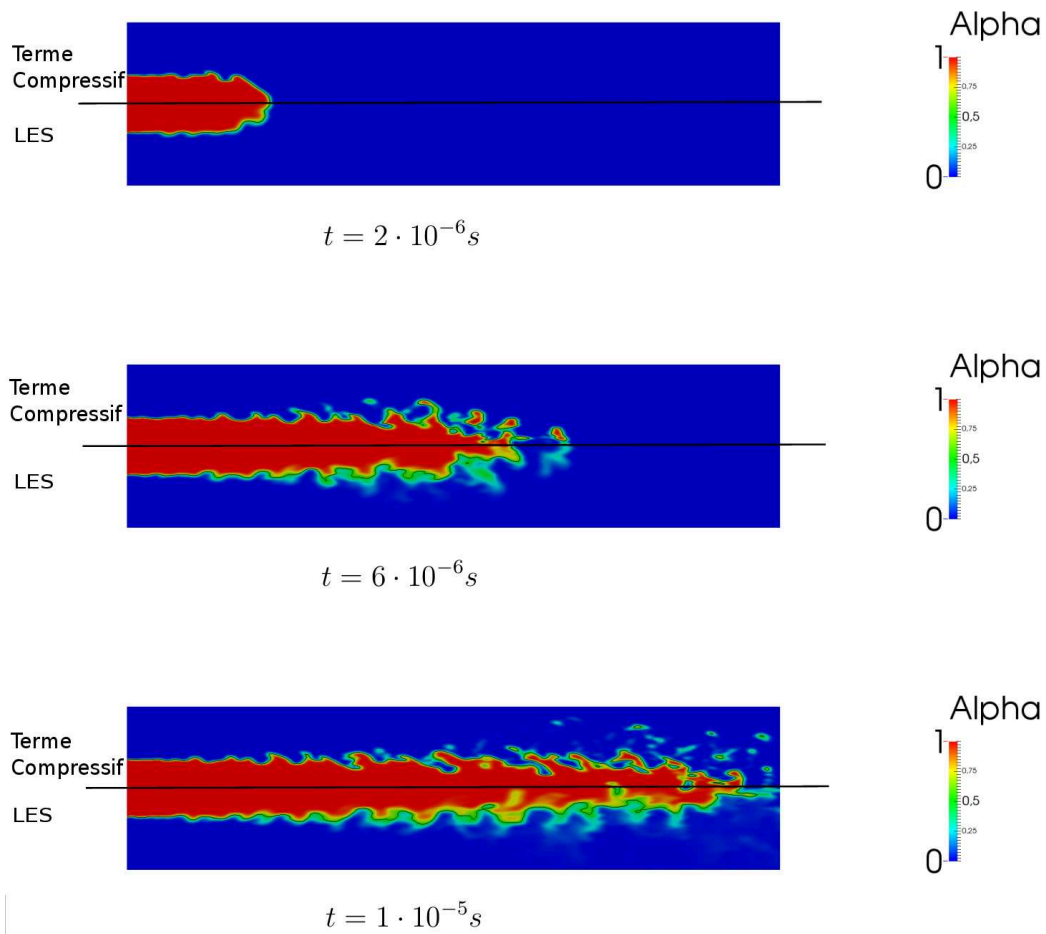


FIGURE 4.8 – Évolution temporelle d'un jet en utilisant dans la partie haute une méthode de suivi d'interface compressive et dans la partie basse des termes de sous maille.

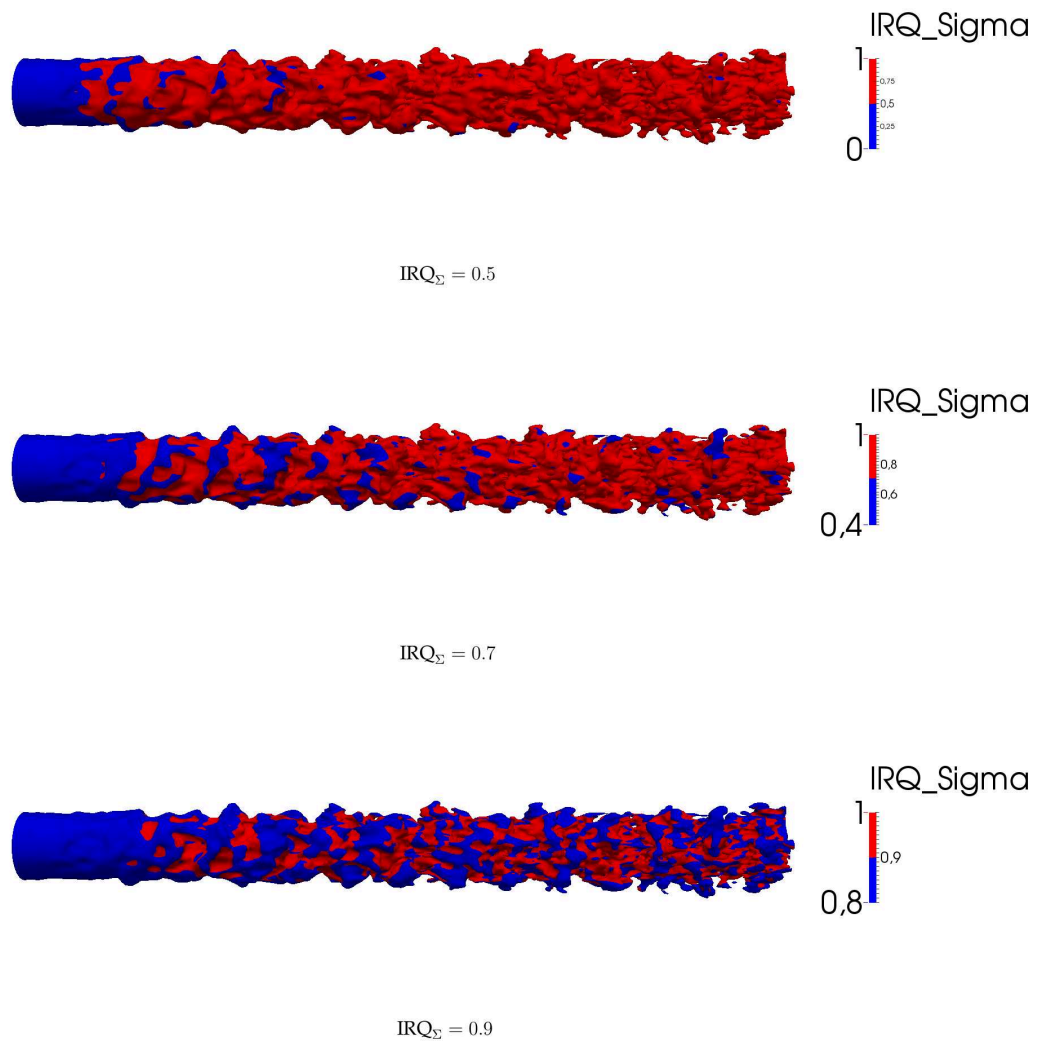


FIGURE 4.9 – Évolution des zones non résolues sur l'isosurface 0.5 de la fraction volumique de liquide pour différents critères de transition IRQ_{Σ} : 0.5, 0.7, 0.9 (de haut en bas)

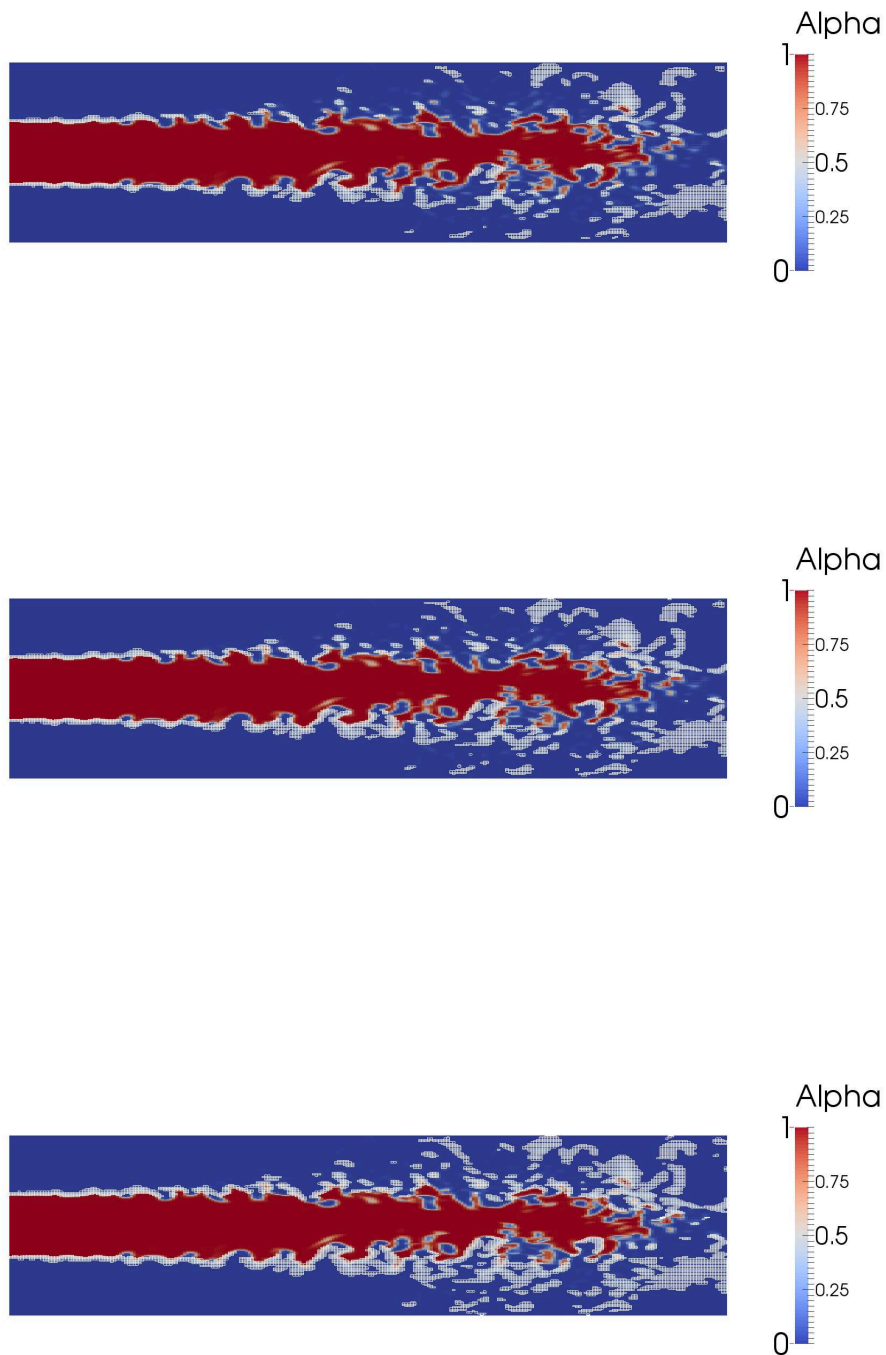


FIGURE 4.10 – Évolution des zones non résolues en blanc pour différents critères de transition IRQ_{Σ} : 0.65, 0.75, 0.9 (de haut en bas)

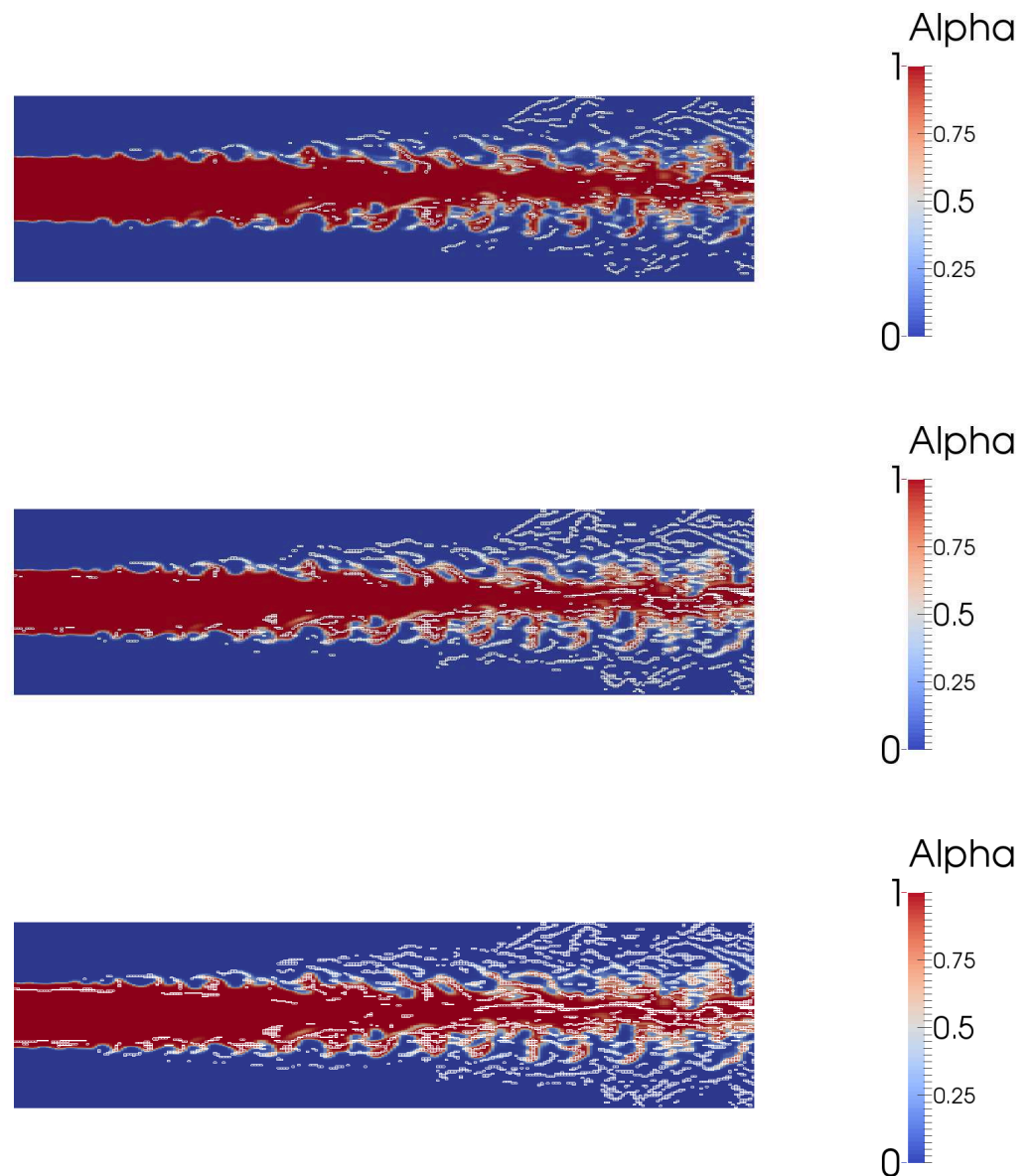
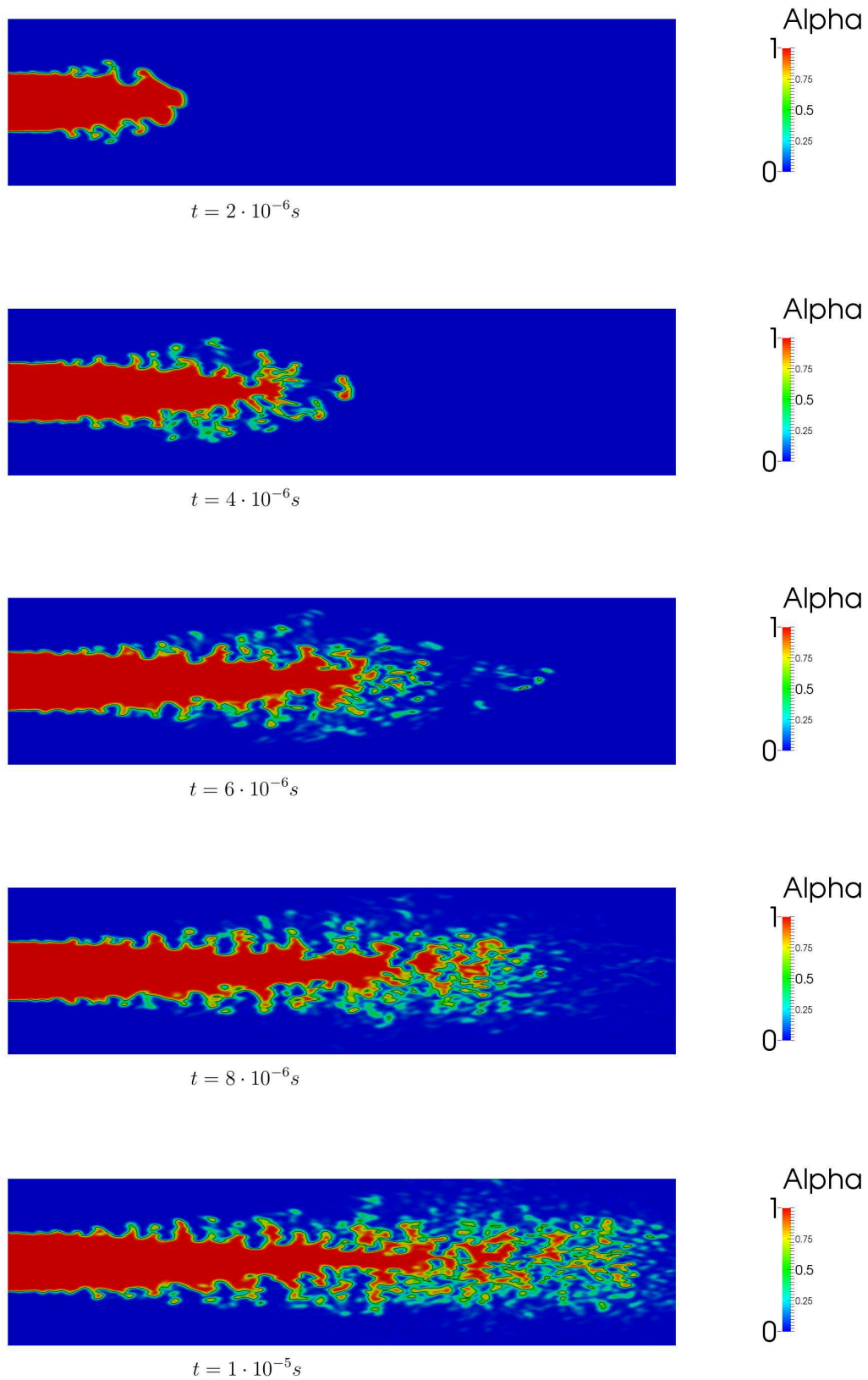
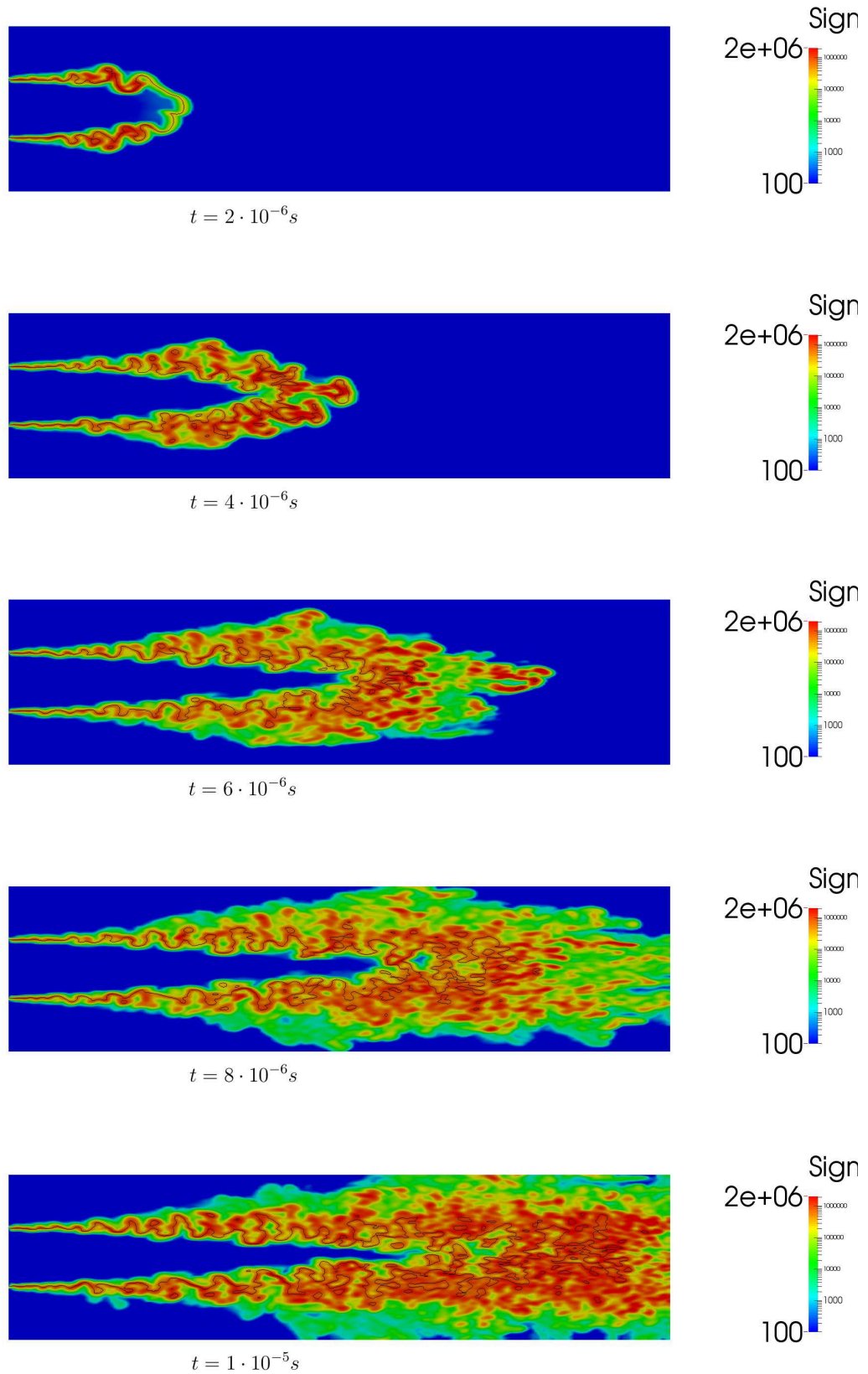
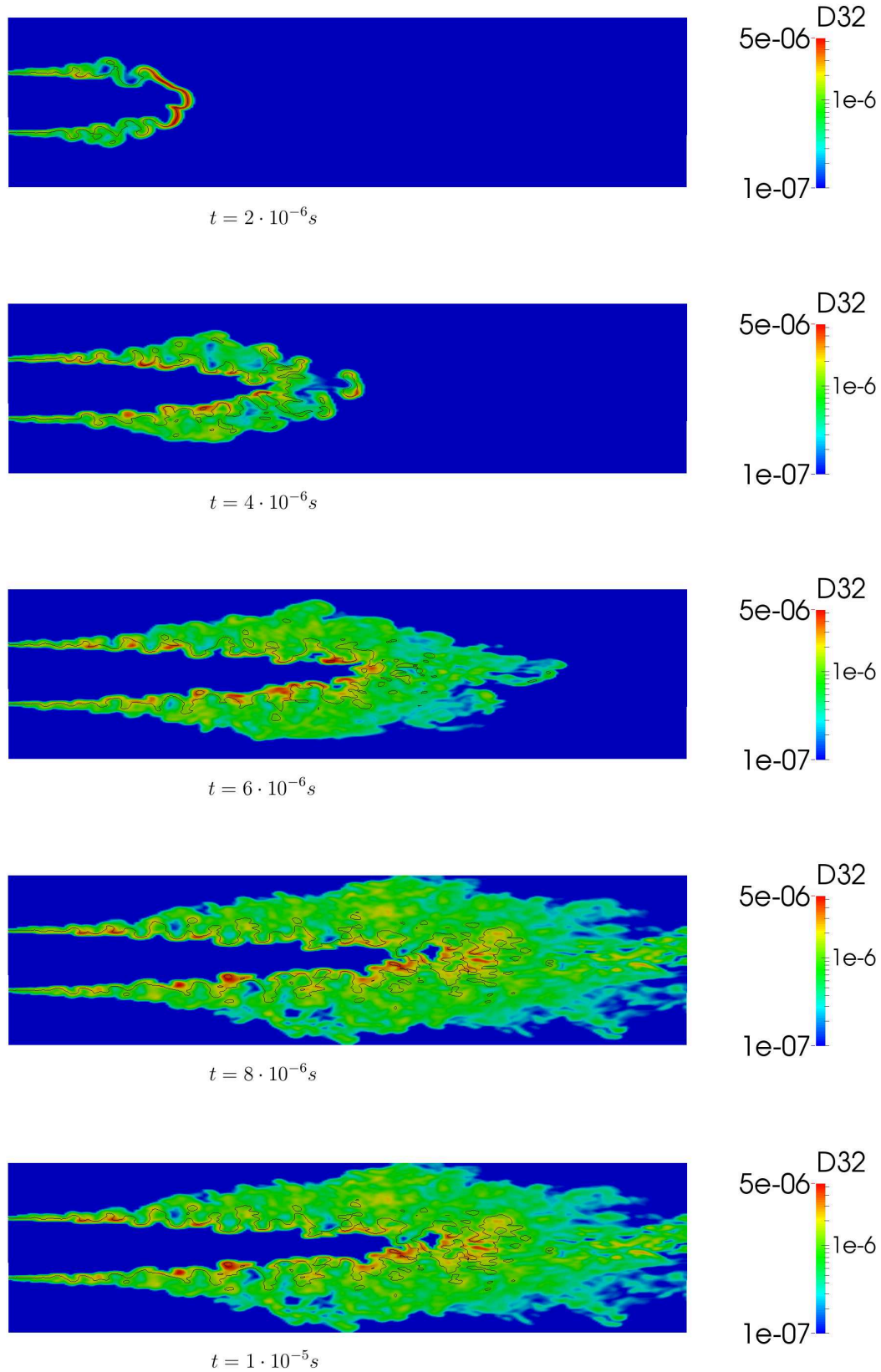


FIGURE 4.11 – Évolution des zones non résolues en blanc pour différents critères de transition IRQ_k : 0.5, 1, 1.5 (de haut en bas)

FIGURE 4.12 – Évolution temporelle de la fraction volumique de liquide α

FIGURE 4.13 – Évolution temporelle de la densité d'interface Σ

FIGURE 4.14 – Évolution temporelle de l'échelle du diamètre de Sauter D_{32}

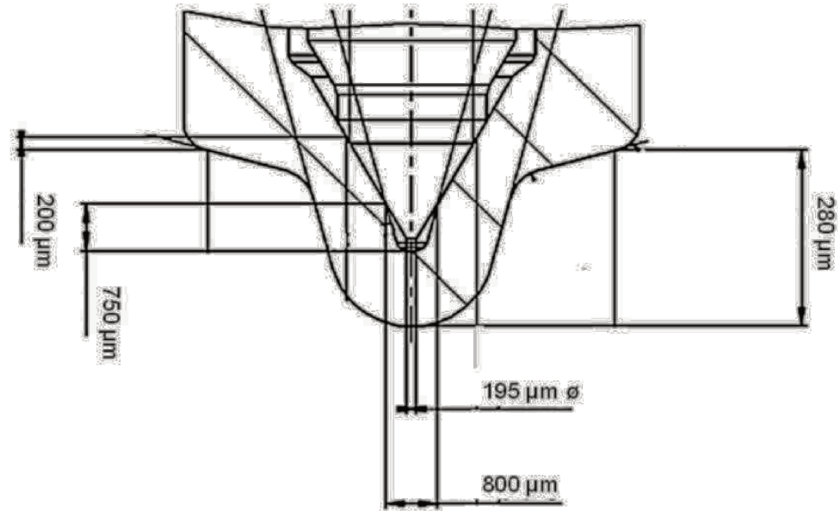


FIGURE 4.15 – Représentation schématique de l’injecteur utilisé par Kamel Lounnaci (schéma issu de thèse de Lounnaci)

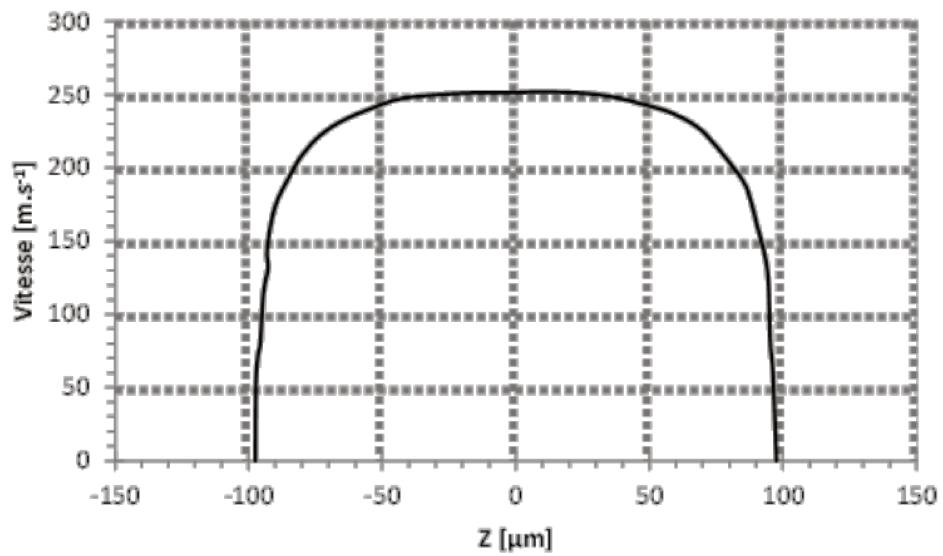


FIGURE 4.16 – Profil de vitesse à la sortie de l’injecteur (Thèse Kamel Lounnaci)

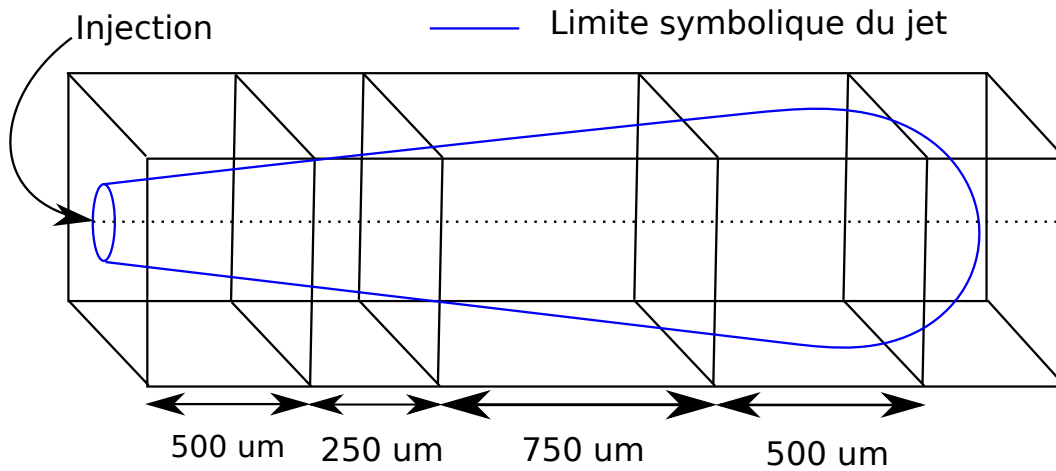


FIGURE 4.17 – Visualisation de la localisation des profils radiaux en : $500\mu m$, $700\mu m$, $1500\mu m$, $2000\mu m$

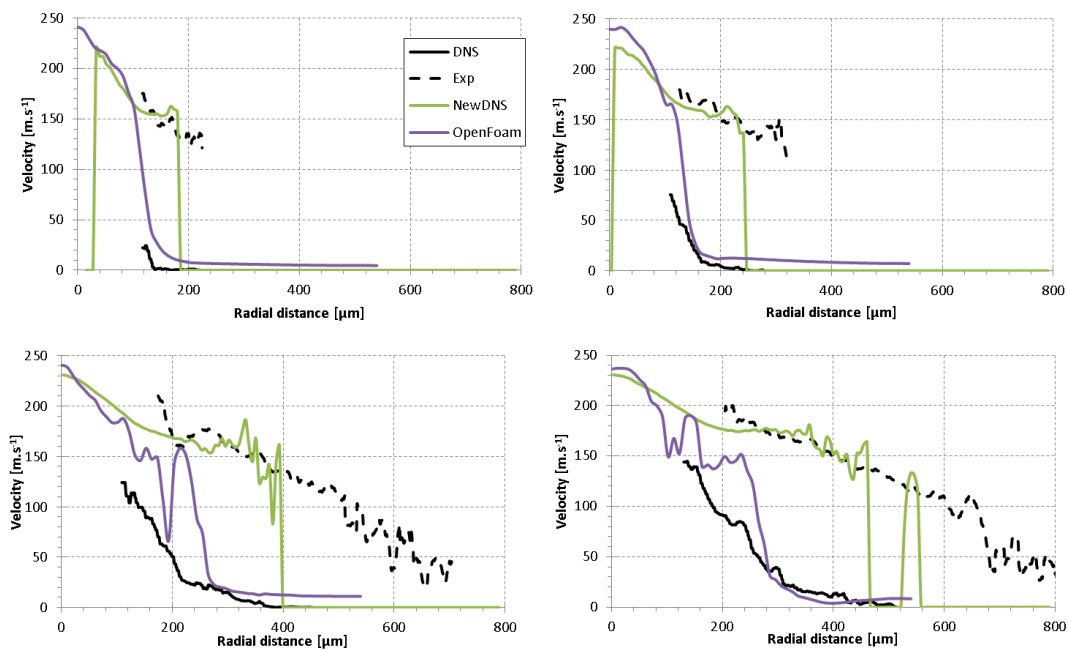


FIGURE 4.18 – Évolution de la vitesse interfaciale en fonction de la distance à l'axe d'injection pour différentes positions suivant l'axe : $500\mu m$, $750\mu m$, $1500\mu m$, $2000\mu m$

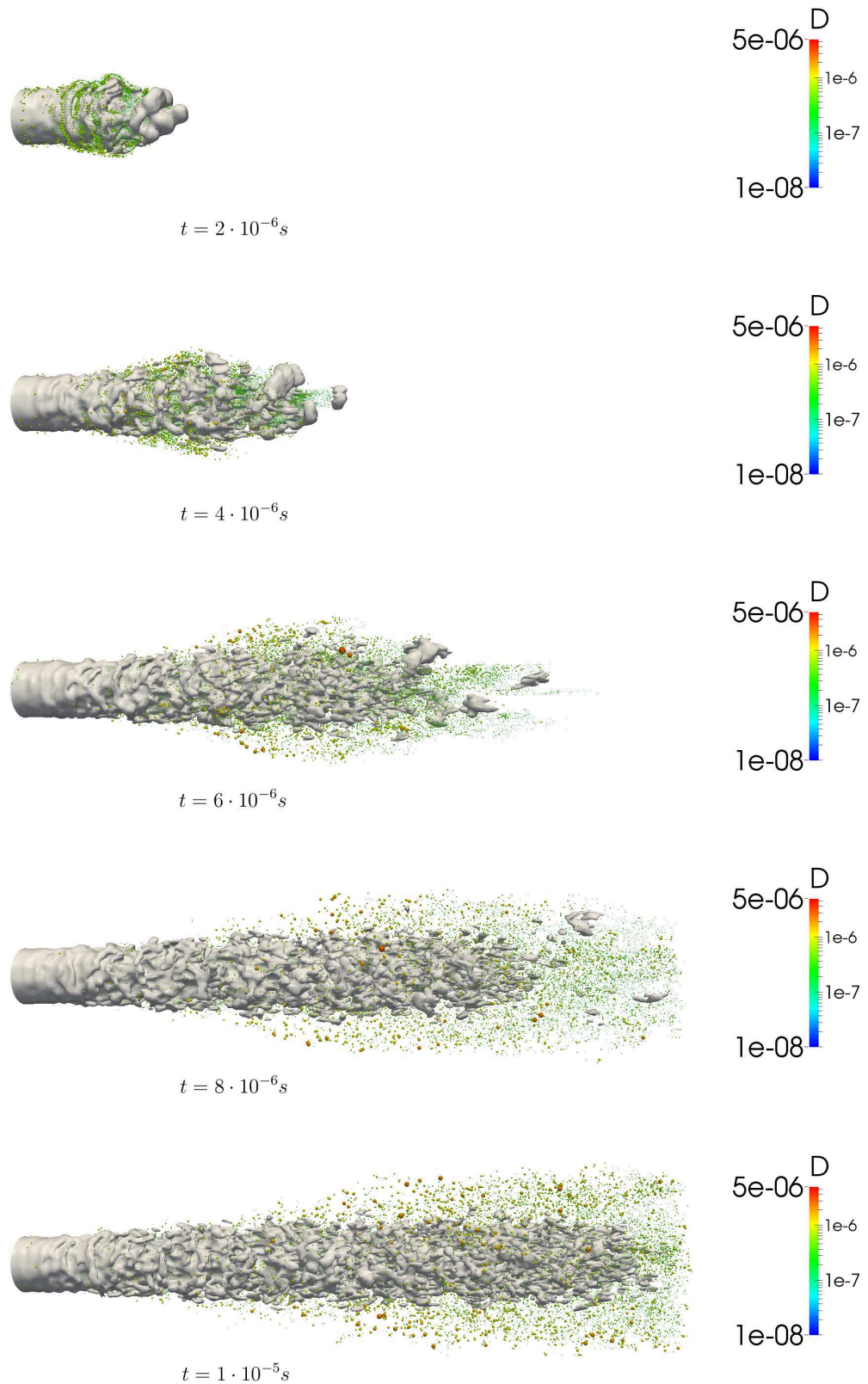


FIGURE 4.19 – Évolution de l'isosurface 0.5 de la fraction volumique de liquide avec les particules lagrangiennes au temps $t = 2 \cdot 10^{-6} s$ à $t = 1 \cdot 10^{-5} s$.

Chapitre 5

Conclusion Générale

Le principal objectif de la thèse consistait à développer un modèle LES capable de rendre compte des principales caractéristiques d'un écoulement liquide/gaz dans un régime d'atomisation, tels que ceux rencontrés au sein des moteurs à combustion. Et ce, depuis la zone primaire jusque dans la phase dispersée.

Après une étude bibliographique du phénomène en question et des possibilités offertes par les modélisations actuelles, des investigations impliquant une série de tests et d'importants développements ont été menées. Finalement, la mise en oeuvre de ce modèle a été réalisée et des premiers résultats ont pu être obtenus sur une configuration proche de l'injection Diesel. On exprime donc ici les contributions du présent travail et les conclusions que nous en avons tirées, ainsi que les perspectives, à court terme puis à plus longue échéance.

Dans le premier chapitre nous avons détaillé le processus d'atomisation. Nous avons dans un premier temps introduit les nombres sans dimensions qui caractérisent les sprays et définissent les nombreux phénomènes physiques, ceux-ci présentant une grande variété d'échelles temporelles et spatiales qui jouent sur l'atomisation primaire : turbulence, cavitation, instabilités de surface, etc. Au final la topologie globale du spray est déterminée par la modélisation multiéchelle de tout ces phénomènes.

Dans un second temps les différentes méthodes numériques permettant de simuler l'atomisation primaire d'un spray liquide ont été décrites. Les différents formalismes, c'est-à-dire DNS, RANS et LES pour la dynamique de l'écoulement et les méthodes de capture de l'interface ou de description du spray ont été présentés.

- Il a été vu que l'approche DNS couplée avec l'utilisation de méthodes spécialement consacrées au suivi d'interface, la méthode VOF ou encore la fonction level-set, constituait un formalisme capable de simuler l'atomisation primaire,

on rappelle par exemple les travaux de Ménard et al [4]. Cependant l'utilisation de ce formalisme est restreint à de petits domaines de calcul et des géométries relativement simples à cause du coût numérique trop important. Simuler la totalité d'un spray qui peut aller jusqu'à plusieurs centaines de diamètres est difficilement envisageable. Cependant, moyennant des algorithmes précis et considérant le fait que la DNS ne requiert pas de modélisation, ce formalisme permet une compréhension accrue du phénomène d'atomisation et peut avoir valeur de point de comparaison pour les modèles RANS ou LES. Dans de nombreux cas c'est le seul moyen d'obtenir des données de validation, propriété dont nous nous sommes servis dans les chapitres suivants.

- Avec l'approche RANS l'interface liquide/gaz ne peut être explicitement prise en compte et les modèles d'atomisation sont principalement basés sur une approche phénoménologique du problème pour prendre en compte la zone primaire d'atomisation. Ainsi, les modèles WAVE et ELSA ont été détaillés. Ces deux modèles diffèrent par le fait que, dans le premier, les auteurs considèrent que ce sont les instabilités qui pilotent l'atomisation primaire alors que, dans le second, les auteurs accordent un rôle majeur au phénomène de turbulence même si celle-ci est peut être initiée par les instabilités de surface. Cependant en pratique, ces modèles doivent être adaptés en fonction de la géométrie ou du point de fonctionnement de l'injecteur.
- Concernant l'approche LES, peu de méthodes spécifiquement dédiées à l'atomisation primaire ont, à notre connaissance, été développées. La littérature révèle néanmoins l'existence d'études basées sur une méthodologie quasi-identique, consistant à utiliser les méthodes de suivi d'interface développées en DNS et de modéliser la turbulence par un modèle classiquement utilisé en LES monophasique (par exemple le modèle de Smagorinsky pour le tenseur de Reynolds de sous maille). Les résultats ont montré le fort potentiel du formalisme LES à décrire le phénomène d'atomisation primaire, notamment les premières instabilités de la colonne liquide si celles-ci ont lieu aux grands échelles : par exemple le battement d'un jet. Cependant, les auteurs notent que les méthodes explicites de suivi d'interface empêchent clairement la description des structures ayant une taille inférieure à celle de la maille. Ils s'accordent donc sur le fait que les résultats dépendent de la résolution du maillage utilisé et que des investigations plus profondes sont nécessaires.

L'étude de ces différentes méthodes nous a permis de mettre en évidence les difficultés liées à l'étude de l'atomisation dans un contexte numérique.

Dans le chapitre 2 nous mettons en évidence qu'il est extrêmement difficile de représenter les plus fines structures d'un jet liquide, en particulier pour le processus d'atomisation à haut Weber. Ce problème met en avant la nécessité de réaliser des modèles de sous mailles dédiés à la description de l'interface liquide-gaz. Il faut ainsi pouvoir modéliser les plus petites structures liquides comme par exemple réaliser un couplage Euler Lagrange, pour transformer les plus fines structures du jet liquide en simple gouttes pouvant alors être décrites de manière simplifiée par exemple de manière Lagrangienne. Le couplage Euler-Lagrange est ensuite étudié. Tout d'abord, il faut être en mesure de détecter les structures liquides, pour cela un algorithme de labélisation a été mis en place. Ensuite la question des critères de transition permettant de passer de l'approche Euler vers Lagrange est abordé en nous appuyant sur les modèles utilisés dans la littérature. Comme on souhaite transformer les petites structures liquides quasi sphériques en particules lagrangiennes deux critères de transitions ont été sélectionnés, un volume référence de transition et une mesure d'excentricité. Le premier critère représente la taille de la structure liquide alors que le deuxième représente sa forme. Les gouttes lagrangiennes sont ensuite initialisées en respectant les principes de conservation portant sur les quantités issues de la partie eulérienne. Ainsi plusieurs caractéristiques des gouttes lagrangiennes sont extraites de la zone de calcul eulérien comme leur positions, vitesses, diamètre. Enfin, les structures liquides sont supprimées de la représentation Eulerienne résolues.

Une analyse de l'influence de la transformation sur l'évolution de différentes grandeurs physiques gaz ou liquide : la masse, la quantité de mouvement et l'énergie cinétique turbulent, a été réalisée. Nous avons montré la difficulté de limiter les erreurs liées au gaz créés lors de la transformation. Enfin, la transformation est une source de dissipation de l'énergie cinétique turbulente du liquide. Ce couplage présente donc malgré ces avantages des limitations non négligeables. Face à ces difficultés, mais toujours dans l'optique de réduire le coût numérique de nos simulations, nous nous sommes donc intéressés à une autre possibilité, à savoir réaliser des simulations utilisant le formalisme LES Eulerien incluant une interface de sous-maille. Celle-ci permet de résoudre uniquement les grandes échelles et donc d'avoir une taille de maille plus grande impliquant une réduction du coût CPU. Mais dans ce cas la description eulérienne consistante du le spray de sous-maille requiert des modèles physiques et numérique nouveaux pour décrire l'interface de sous-maille.

Le chapitre 3 présente les étapes du développement du modèle LES d'atomisation. Nous avons dans un premier temps rappelé et précisé les bases de la simulation aux grandes échelles. Nous avons filtré les équations monophasiques pour mettre en évi-

dence le terme de sous-maille τ_{ij} . Les modèles utilisés dans la littérature à savoir le modèle de Smagorinsky et de similarité d'échelles sont alors rappelés. Les équations monofluides ont ensuite été présentées puis filtrées analytiquement pour mettre en évidence les termes sous-maille spécifiques au cas diphasique. Un rappel sur la hiérarchisation des différents de termes sous-maille a été effectué. Les termes de sous-maille de tension de surface et le terme visqueux sont négligeables devant le terme convectif et le terme temporel.

Dans un second temps nous avons pu définir les objectifs de notre modèle. Ainsi, l'idée était de disposer d'un modèle LES capable de passer continument d'une description d'interface résolue avec prise en compte de la tension de surface lorsque que les échelles le permettent à une description moyenne du spray au sein de chaque maille de calcul, dans le cas contraire, c'est-à-dire lorsque les échelles des plus petites inclusions de l'interface ne peuvent plus être résolues par la discrétisation spatiale. Ce changement de formalisme se fait de manière dynamique dans le domaine de calcul. Deux critères de transformation ont été mis en places afin de déterminer la résolution nécessaire pour chaque maille de calcul (DNSI ou LES), qui sont nommés IRQ (Interface Resolution Quality). Le premier critère est basé sur ratio de la densité d'interface résolue et le deuxième est basé sur la courbure de l'interface vis à vis de la résolution du maillage.

Dans un dernier temps une nouvelle approche pour le calcul de la vitesse intervenant dans les équations de transport de la fraction volumique de liquide et de la densité d'interface liquide/gaz est proposée. Cette approche repose sur une utilisation couplée des approches Eulérienne et Lagrangienne en zone diluée du jet. Dans chaque cellule, en s'assurant de la conservation de la masse de liquide ainsi que du diamètre moyen de Sauter, l'approche lagrangienne permet d'obtenir une distribution de taille de gouttes liquides hybride Euler - Lagrange. La vitesse est ensuite reconstruite comme une fonction de la vitesse Eulérienne et de la vitesse Lagrangienne.

Le dernier chapitre présente les premiers résultats obtenus. L'objectif principal de celui-ci était d'évaluer la potentialité du modèle LES à rendre compte des principales caractéristiques d'un écoulement liquide/gaz dans un régime d'atomisation. Pour ce faire, et face au manque de données expérimentales dans la zone proche injecteur, le code ARCHER de type DNS a été utilisé comme base de comparaison des résultats obtenus. Dans un premier temps, une étude du comportement qualitatif du modèle sur un cas type a été réalisée afin de savoir si les objectifs généraux du modèle étaient atteints. Ainsi les coupes à différents pas de temps des principales variables du modèle nous permettent ici de réaliser un bilan concernant le comportement du modèle

d'atomisation :

- En premier lieu, il est important de retenir que c'est le flux turbulent de liquide de sous-maille qui permet l'apparition du spray de sous maille. Le modèle d'atomisation a été construit en ce sens comme cela a été détaillé dans le chapitre 3 et de ce point de vue il répond, au moins de manière qualitative, aux attentes imposées lors de son développement.
- Le transport de la densité d'interface permet bien, quant à lui, d'obtenir une description du spray de sous maille. L'analyse du comportement du terme source de la densité d'interface montre que les zones où le taux de turbulence est fort sont à l'origine de la fragmentation du spray de sous maille, ceci s'exprimant par une augmentation locale de la densité d'interface.
- La connaissance simultanée de la fraction de volume et de la densité d'interface permet de reconstruire une échelle de longueur locale équivalente au diamètre moyen de Sauter pour des gouttes, L_{32} . Cette échelle montre un comportement cohérent : les structures liquides résolues génèrent un spray de sous maille dont les échelles caractéristiques initiales sont proches de la taille de la maille. A mesure que l'on s'éloigne de l'injecteur, le spray de sous-maille se fragmente encore, ceci se traduisant par une diminution globale du L_{32} .
- Enfin le passage Lagrangien permet d'améliorer la représentation des particules du spray avec glissement.

Perspectives

Lorsque l'on veut simuler des configurations expérimentales d'atomisation plusieurs problématiques apparaissent. D'une part les ressources numériques dont nous avons besoin pour réaliser des simulations de type DNS sont très importantes. De plus, il n'est pas possible de garantir la capture de tous les phénomènes physiques.

Une solution serait d'utiliser un solveur à raffinement automatique de maillage (AMR). On pourrait ainsi raffiner le maillage seulement aux endroits nécessaires (à définir à partir de critères), ce qui pourrait permettre d'économiser dans ce genre de configuration un temps de calcul très important. Des premiers calculs réalisés à partir du solveur AMR développé par Doring et Ménard permettent d'estimer une économie d'un facteur environ égal à 8 en temps Cpu. On donne une illustration sur la figure d'une simulation réalisée avec la méthode AMR sur un jet coaxial via le code ARCHER. On distingue sur l'image différents niveaux de raffinement de la maille de calcul.

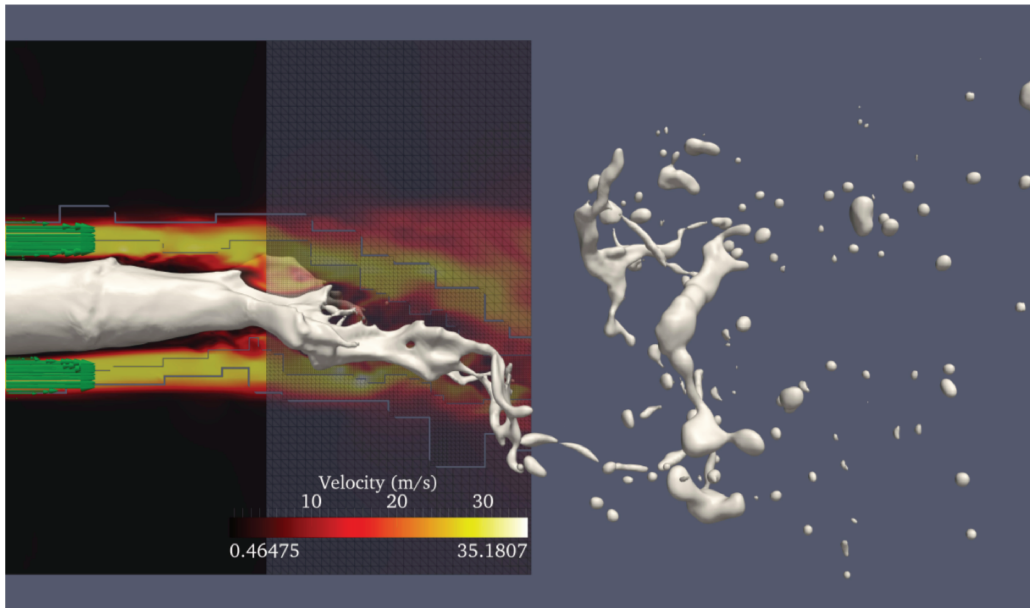


FIGURE 5.1 – Jet coaxial réalisé avec une méthode de raffinement automatique de maillage via le code ARCHER

Par ailleurs pour simuler une chambre de combustion, il faudrait toujours mailler l'intérieur de l'injecteur. Ainsi les mailles les plus fines sont dans l'injecteur à l'endroit où l'écoulement est le plus rapide. Ceci implique une contrainte forte sur les pas de temps. Dans cette zone l'écoulement est dominé par la convection. Les méthodes les plus adaptées seraient alors Lagrangiennes car elles traitent la convection naturellement. Cependant au lieu d'injecter des "gouttes" on pourrait résoudre l'écoulement diphasique continue avec une méthode lagrangienne DNS et capture de l'interface : une approche SPH qu'il faut ensuite coupler avec le reste du calcul en volume fini [118].

Une autre solution est d'utiliser un modèle permettant de simuler les phénomènes physiques de sous-maille. La méthode de changement de formalisme développée dans le chapitre 3 a cet objectif et des améliorations peuvent lui être apportées. Si l'on souhaite décrire plus fidèlement la phase dispersée ainsi que l'interface résolue une montée en ordre des schémas numériques utilisés est envisageable. En effet par exemple les schémas de la classe Galerkin discontinue sont plus précis que les schémas proposés dans le code OpenFOAM. De plus, les critères de transitions entre la phase dispersée et l'interface résolue peuvent être améliorés notamment aux niveaux de leurs valeurs

seuils. Notons également que beaucoup d'autres modélisations de sous-maille existent et que toutes n'ont pas pu être testées. Il doit notamment être possible de mieux relier les effets de sous-maille aux différentes instabilités de surface. Enfin il est possible d'améliorer le modèle ELSA pour prendre en compte une distribution de taille de spray [119].

Des tests sont en cours pour réaliser des calculs prenant en compte l'écoulement dans la buse de l'injecteur. Cette perspective, associée à celles précédemment exprimées, laisse alors entrevoir, un puissant outil de prédiction permettant d'améliorer, encore, le processus de combustion dans les moteurs.

Finalement, le phénomène d'évaporation devra être pris en compte [61]. Des équations de transport supplémentaires devront alors être prises en compte (énergie, fraction de carburant évaporé, etc) et devront être munies des modélisations de sous-maille associées. Compte tenu de la finesse de la couche limite thermique proche de l'interface liquide/gaz, déjà difficile à prendre en compte en DNS [120], celle-ci ne pourra vraisemblablement pas être résolue en LES. Dans ces conditions, le terme source d'évaporation va également requérir une modélisation. Il faudra également prendre en compte la régression de l'interface résolue, du fait de la perte de masse de liquide. Et dans la mesure où l'évaporation influe sur la quantité d'interface, un nouveau terme source à modéliser devra faire son apparition dans l'équation de transport de cette variable.

Bibliographie

- [1] T. Ménard. *Développement d'une méthode Level set pour le suivi d'interface. Application à la rupture de jet liquide*. PhD thesis, Université de Rouen, 2007.
- [2] J. Chesnel. *Simulation aux grandes échelles de l'atomisation : Application à l'injection automobile*. PhD thesis, CORIA, 2006.
- [3] Numerical simulation of primary break-up and atomization : Dns and modelling study. *International Journal of Multiphase Flow*, 35(3) :247 – 260, 2009.
- [4] T. Ménard, S. Tanguy, and A. Berlemont. Coupling level set/vof/ghost fluid methods : Validation and application to 3d simulation of the primary break-up of a liquid jet. *International Journal of Multiphase Flow*, 33(5) :510 – 524, 2007.
- [5] J. Shinjo and A. Umemura. Simulation of liquid jet primary breakup : Dynamics of ligament and droplet formation. *International Journal of Multiphase Flow*, 36(7) :513 – 532, 2010.
- [6] O. Desjardins, V. Moureau, and H. Pitsch. An accurate conservative level set/ghost fluid method for simulating turbulent atomization. *Journal of Computational Physics*, 227(18) :8395 – 8416, 2008.
- [7] R. D. Reitz. Modeling atomization process in high-pressure vaporizing sprays. 1987.
- [8] M. Herrmann. A parallel eulerian interface tracking/lagrangian point particle multi-scale coupling procedure. *Journal of Computational Physics*, 229(3) :745 – 759, 2010.
- [9] C.W. Hirt and B.D. Nichols. Volume of fluid (vof) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics*, 39(1) :201 – 225, 1981.
- [10] G. Tomar, D. Fuster, S. Zaleski, and S. Popinet. Multiscale simulations of primary atomization. *Computers and Fluids*, 39(10) :1864 – 1874, 2010.
- [11] J. Chesnel, J. Reveillon, T. Menard, and F.-X. Demoulin. Large eddy simulation of liquid jet atomization. *Atomization and Spray*, 21(9) :711–736, 2011.

- [12] Emmanuel Villermaux. Fragmentation. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 39 :419–446, 2007.
- [13] Jens Eggers and Emmanuel Villermaux. Physics of liquid jets. *Reports on progress in physics*, 71(3) :036601, 2008.
- [14] C. baumgarten. *Mixture formation in internal combustion engines*. Springer, 2006.
- [15] P-K Wu and GM Faeth. Aerodynamic effects on primary breakup of turbulent liquids. *Atomization and Sprays*, 3(3), 1993.
- [16] P-K Wu, RF Miranda, and GM Faeth. Effects of initial flow conditions on primary breakup of nonturbulent and turbulent round liquid jets. *Atomization and Sprays*, 5(2), 1995.
- [17] GM Faeth, L-P Hsiang, and P-K Wu. Structure and breakup properties of sprays. *International Journal of Multiphase Flow*, 21 :99–127, 1995.
- [18] RD Reitz and FV Bracco. Mechanism of atomization of a liquid jet. *Physics of Fluids (1958-1988)*, 25(10) :1730–1742, 1982.
- [19] Arthur H. Lefebvre. *Atomization and Sprays*. CRC Press, 1988.
- [20] José V Pastor, Emilio Encabo, and Santiago Ruiz. New modelling approach for fast online calculations in sprays. Technical report, SAE Technical Paper, 2000.
- [21] E. Bae. Characterization of the intergenic rna profile at abdominal-a and abdominal-b in the drosophila bithorax complex at abdominal-a and abdominal-b in the drosophila bithorax complex. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, 99, 2002.
- [22] A. Vallet and R. Borghi. Modélisation eulerienne de l’atomisation d’un jet liquide. *Comptes Rendus de l’Académie des Sciences - Series IIB - Mechanics- Physics-Astronomy*, 327 :1015–1020, 1999.
- [23] U. Piomelli. Large-eddy simulation : achievements and challenges. *Progress in Aerospace Sciences*, 35(4) :335 – 362, 1999.
- [24] H.C Chen, V.C Patel, and S Ju. Solutions of reynolds-averaged navier-stokes equations for three-dimensional incompressible flows. *Journal of Computational Physics*, 88(2) :305 – 336, 1990.
- [25] B.E. Launder and B.I. Sharma. Application of the energy-dissipation model of turbulence to the calculation of flow near a spinning disc. *Letters in Heat and Mass Transfer*, 1(2) :131 – 137, 1974.
- [26] Eugenio Aulisa, Sandro Manservigi, and Ruben Scardovelli. A mixed markers and volume-of-fluid method for the reconstruction and advection of interfaces in two-phase and free-boundary flows. *Journal of Computational Physics*, 188(2) :611–639, 2003.

- [27] Ruben Scardovelli and Stephane Zaleski. Interface reconstruction with least-square fit and split eulerian–lagrangian advection. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 41(3) :251–274, 2003.
- [28] Kensuke Yokoi. Efficient implementation of {THINC} scheme : A simple and practical smoothed {VOF} algorithm. *Journal of Computational Physics*, 226(2) :1985 – 2002, 2007.
- [29] M. Sussman and E.G. Puckett. A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3d and axisymmetric incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 162(2) :301 – 337, 2000.
- [30] W.F. Noh and P.R. Woodward. Slic (simple line interface calculation). *Lecture Notes in Physics*, 59 :330–340, 1976.
- [31] R. DeBar. Fundamentals of the kraken code. *Technical report, Lawrence Livermore National Laboratory*, 1974.
- [32] D.L. Youngs. Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion. *Numerical Methods for Fluid Dynamics Conference*, pages 273–285, 1982.
- [33] J.E. Pilliod and E.G. Puckett. Second-order accurate volume-of-fluid algorithms for tracking material interfaces. *J. Computational Physics*, 199(2) :465–502, 2004.
- [34] S. Osher and J.A. Sethian. Fronts propagating with curvature-dependent speed : Algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *Journal of Computational Physics*, 79(1) :12 – 49, 1988.
- [35] J.P. Zolesio M.C. Delfour. *Shapes and Geometries : metrics, analysis, differential calculus, and Optimization*. 2011.
- [36] Olivier Desjardins, Jeremy McCaslin, Mark Owkes, and Peter Brady. Direct numerical and large-eddy simulation of primary atomization in complex geometries. *Atomization and Sprays*, 23(11), 2013.
- [37] Mark Sussman and Elbridge Gerry Puckett. A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3d and axisymmetric incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 162(2) :301–337, 2000.
- [38] J.A. Sethian. Fast marching methods. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 41 :199–235, 1999.
- [39] G.C. Buscaglia, E.A. Dari, and F. Mut. A new mass conserving algorithm for level set redistancing on unstructured meshes. *Mecanica Computacional*, XXIII, 2004.
- [40] E. Berberovic. *Investigation of the Free-surface flow associated with drop impact : numerical simulation and theoretical Modeling*. PhD thesis, Université de Darmstadt, 2010.

- [41] H.G Weller. Derivation, modelling and solution of the conditionally averaged two-phase flow equation. *Technical report TR/HGW/02 OpenCFD Ltd.*, 2005.
- [42] H.G Weller. A new approach to vof-based interface capturing methods for incompressible and compressible flow. *Technical report TR/HGW/04 OpenCFD Ltd.*, 2006.
- [43] E. Olsson and G. Kreiss. A conservative level set method for two phase flow, i. *J. Computational Physics*, 210 :225–24, 2005.
- [44] E. Olsson and G. Kreiss. A conservative level set method for two phase flow, ii. *Elsevier Science*, 2006.
- [45] M. Gorokhovski. The stochastic sub-grid-scale approach for spray atomization. *Journal of Atomization and Spray*, 11 :505–519, 2001.
- [46] M. Gorokhovski and V. Saveliev. Further analyses of kolmogorov’s model of breakup. *Physics of Fluids*, 15 :184–192, 2003.
- [47] M. and M. Herrmann. Modeling primary atomization. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 40 :343–366, 2008.
- [48] Andrey Nikolaevich Kolmogorov. The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large reynolds numbers. In *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, volume 30, pages 299–303, 1941.
- [49] Ariane Vallet. *Contribution a la modelisation de l’atomisation d’un jet liquide haute pression*. PhD thesis, 1997.
- [50] AA Burluka, R Borghi, et al. Development of a eulerian model for the “atomization” of a liquid jet. *Atomization and sprays*, 11(6), 2001.
- [51] L.P. Hsiang. *Near-limit drop deformation and secondary breakup*. University of Michigan, 1994.
- [52] M. Patterson and R. Reitz. Modeling the effects of fuel spray characteristics on diesel engine combustion and emission. *SAE Technical Paper 980131*, 1998.
- [53] R. Reitz and R. Diwakar. Effect of drop breakup on fuel sprays. *SAE Technical Paper 860469*, 1986.
- [54] Nicholls J. Stream and droplet breakup by shock waves. *NASA SP-194*, 1972.
- [55] M. Larimi and J. Tiainen. Diesel spray simulation and kh-rt wave model. *SAE Technical Paper 2003-01-3231*, 2003.
- [56] D.H. Sharp. An overview of rayleigh-taylor instability. *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 12(1–3) :3 – 18, 1984.

- [57] F. A. Williams. Spray combustion and atomization. *Physics of Fluids*, 1(6), 1958.
- [58] D. Zuzio and J.L. Estivalezes. An efficient block parallel {AMR} method for two phase interfacial flow simulations. *Computers & Fluids*, 44(1) :339 – 357, 2011.
- [59] W. J. Coirier. *An Adaptively-Refined, Cartesian, Cell-Based Scheme for the Euler and Navier-Stokes Equations*. PhD thesis, NASA Lewis Research Center, Cleveland, OH, USA, October 1994.
- [60] S.TANGUY. *Développement d'une méthode de suivi d'interface. Applications aux écoulements diphasiques*. PhD thesis, CORIA, Juin 2004.
- [61] B. Duret. *Simulation numérique directe des écoulements liquide-gaz avec évaporation : application à l'atomisation*. PhD thesis, Université de Rouen, 2013.
- [62] G.S. Jiang and C.W. Shu. Efficient implementation of weighted {ENO} schemes. *Journal of Computational Physics*, 126(1) :202 – 228, 1996.
- [63] J. C. Butcher. *The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations : Runge-Kutta and General Linear Methods*. Wiley-Interscience, New York, NY, USA, 1987.
- [64] J.R. Dormand and P.J. Prince. A family of embedded runge-kutta formulae. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 6(1) :19 – 26, 1980.
- [65] Anthony A Amsden and Francis H Harlow. A simplified mac technique for incompressible fluid flow calculations. *Journal of Computational Physics*, 6(2) :322 – 325, 1970.
- [66] M. Hestenes. Iterative methods for solving linear equations. *NAML Report*, 52(9), 1951.
- [67] Marianne Akian. *Méthodes multigrilles en contrôle stochastique*. PhD thesis, Paris 9, 1990.
- [68] Marianne Akian. Analyse de l'algorithme multigrille fmgh de résolution d'équations d'hamilton-jacobi-bellman. In *Analysis and Optimization of Systes*, pages 113–122. Springer, 1990.
- [69] M. Sussman, P. Smereka, and S. Osher. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *Journal of Computational Physics*, 114(1) :146 – 159, 1994.
- [70] R.P. Fedkiw, T. Aslam, B. Merriman, and S. Osher. A non-oscillatory eulerian approach to interfaces in multimaterial flows (the ghost fluid method). *Journal of Computational Physics*, 152(2) :457 – 492, 1999.
- [71] X.D. Liu, R.P. Fedkiw, and M. Kang. A boundary condition capturing method for poisson's equation on irregular domains. *Journal of Computational Physics*, 160(1) :151 – 178, 2000.

- [72] John K. Dukowicz. A particle-fluid numerical model for liquid sprays. *Journal of Computational Physics*, 35(2) :229 – 253, 1980.
- [73] Gordon R. Johnson. Linking of lagrangian particle methods to standard finite element methods for high velocity impact computations. *Nuclear Engineering and Design*, 150(2) :265 – 274, 1994.
- [74] L. Guichard, Julien Réveillon, and R. Hauguel. Direct numerical simulation of statistically stationary one- and two-phase turbulent combustion : A turbulent injection procedure. *Flow, Turbulence and Combustion*, 73(2) :133–167, 2004.
- [75] S. de Chaisemartin, L. Fréret, D. Kah, F. Laurent, R.O. Fox, J. Reveillon, and M. Massot. Eulerian models for turbulent spray combustion with polydispersity and droplet crossing. *Comptes Rendus Mécanique*, 337(6–7) :438 – 448, 2009. Combustion for aerospace propulsion.
- [76] JULIEN REVEILLON and FRANCOIS-XAVIER DEMOULIN. Effects of the preferential segregation of droplets on evaporation and turbulent mixing. *Journal of Fluid Mechanics*, 583 :273–302, 7 2007.
- [77] JULIEN REVEILLON and LUC VERVISCH. Analysis of weakly turbulent dilute-spray flames and spray combustion regimes. *Journal of Fluid Mechanics*, 537 :317–347, 8 2005.
- [78] Mikhael Gorokhovski. The stochastic lagrangian model of drop breakup in the computation of liquid sprays. *Atomization and Sprays*, 11(5), 2001.
- [79] SV Apte, Mikhael Gorokhovski, and Parviz Moin. Les of atomizing spray with stochastic modeling of secondary breakup. *International Journal of Multiphase Flow*, 29(9) :1503–1522, 2003.
- [80] MA Gorokhovski and VL Saveliev. Analyses of kolmogorov’s model of breakup and its application into lagrangian computation of liquid sprays under air-blast atomization. *Physics of Fluids (1994-present)*, 15(1) :184–192, 2003.
- [81] Mikhael Gorokhovski and Marcus Herrmann. Modeling primary atomization. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 40 :343–366, 2008.
- [82] Clayton T Crowe. On models for turbulence modulation in fluid–particle flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 26(5) :719–727, 2000.
- [83] C. Rosales and C. Meneveau. Linear forcing in numerical simulations of isotropic turbulence : Physical space implementations and convergence properties. *Physics of Fluids*, 17(9), 2005.
- [84] V. Eswaran and S.B. Pope. An examination of forcing in direct numerical simulations of turbulence. *Computers & Fluids*, 16(3) :257 – 278, 1988.

- [85] M. Herrman. A balanced force refined level set grid method for two-phase flows on unstructured flow solver grids. *Journal of Computational Physics*, 227(4) :2674–2706, 2008.
- [86] A. J. Reynolds. Thermo-fluid dynamic theory of two-phase flow. by m. ishii. eyrolles 1975. 248 pp. 83f or \$21.60. *Journal of Fluid Mechanics*, 78 :638–639, 12 1976.
- [87] I. Kataoka. Local instant formulation of two-phase flow. *International Journal of Multiphase Flow*, 12(5) :745 – 758, 1986.
- [88] J. Smagorinsky. General Circulation Experiments with the Primitive Equations. *Monthly Weather Review*, 91, 1963.
- [89] A N Kolmogorov. Local structure of turbulence in an incompressible viscous fluid at very high reynolds numbers. *Soviet Physics Uspekhi*, 10(6) :734, 1968.
- [90] Peter D. Lax. Hyperbolic difference equations : A review of the courant-friedrichs-lewy paper in the light of recent developments. *IBM J. Res. Dev.*, 11(2) :235–238, March 1967.
- [91] Pierre Sagaut. *Large eddy simulation for incompressible flows : an introduction*. Scientific computation. Springer, Berlin, 2002.
- [92] J. Boussinesq. Essai sur la théorie des eaux courantes. *l'Académie des Sciences*, 23, 1887.
- [93] M. Germano. Turbulence : the filtering approach. *Journal of Fluid Mechanics*, 238 :325–336, 5 1992.
- [94] J.M. Delhaye. Jump conditions and entropy sources in two-phase systems. local instant formulation. *International Journal of Multiphase Flow*, 1(3) :395 – 409, 1974.
- [95] A. Toutant. *Modélisation physique des interactions entre interfaces et turbulence*. PhD thesis, IMFT, Juin 2010.
- [96] Salih Ozen Unverdi and Grétar Tryggvason. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *Journal of Computational Physics*, 100(1) :25 – 37, 1992.
- [97] Gosman A. De Villiers, E. and H. Weller. Large eddy simulation of primary diesel spray atomization. *SAE Technical Paper 2004-01-0100*, 2004.
- [98] Anthony Leboissetier. *Simulation numérique directe de l'atomisation primaire d'un jet liquide à haute vitesse*. PhD thesis, 2002. Thèse de doctorat dirigée par Zaleski, Stéphane Mécanique des fluides Paris 6 2002.

- [99] Hrvoje Jasak, Aleksandar Jemcov, and Zeljko Tukovic. Openfoam : A c++ library for complex physics simulations. In *International workshop on coupled methods in numerical dynamics*, volume 1000, pages 1–20, 2007.
- [100] H. Jasak. *Error Analysis and Estimation for the Finite Volume Method with Applications to Fluid Flows*. PhD thesis, 1996. Ph.D Thesis, Imperial College of Science, Technology and Medicine, London.
- [101] Kärholm FP. Rhie-chow interpolation in openfoam. 2006.
- [102] C.M. Rhie and W.L. Chow. A numerical study of the turbulent flow past an isolated airfoil with trailing edge separation. *AIAA-82-0998, AIAA/ASME 3rd Joint Thermophysics, Fluids, Plasma and Heat Transfer Conference, St. Louis, Missouri*, 1982.
- [103] R I Issa. Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting. *J. Comput. Phys.*, 62(1) :40–65, January 1986.
- [104] PR SPALART. A one-equation turbulence model for aerodynamic flows. *AIAA Paper*, 1992.
- [105] Lilly DK. The representation of small-scale turbulence in numerical simulation experiments. *Proc IBM Scientific Computing Symp on Environmental Sciences, Yorktown Heights, New York*, 1967.
- [106] A. Yoshizawa. A statistically-derived subgrid model for the large-eddy simulation of turbulence. *Phys, Fluids* 25, 1532–1538, 1982.
- [107] Ulrich Schumann. Subgrid scale model for finite difference simulations of turbulent flows in plane channels and annuli. *Journal of computational physics*, 18(4) :376–404, 1975.
- [108] Daniele Carati, Sandip Ghosal, and Parviz Moin. On the representation of backscatter in dynamic localization models. *Physics of Fluids (1994-present)*, 7(3) :606–616, 1995.
- [109] Demoulin F.X. Blokkeel G., Mura A. and Borghi R. A continuous modelling approach for describing the atomization process from inside the injector to the final spray. *ICLASS, Sorrento*, 2003.
- [110] Camille Hespel, Jean-Bernard Blaisot, Matthieu Gazon, and Gilles Godard. Laser correlation velocimetry performance in diesel applications : spatial selectivity and velocity sensitivity. *Experiments in fluids*, 53(1) :245–264, 2012.
- [111] S. Idlahcen, L. Mees, C. Roze, T. Girasole, and J.B. Blaisot. Time gate, optical layout, and wavelength effects on ballistic imaging. *JOURNAL OF THE*

- OPTICAL SOCIETY OF AMERICA A-OPTICS IMAGE SCIENCE AND VISION, 26(9) :1995–2004, 2009. Idlahcen, Said Mees, Loic Roze, Claude Girasole, Thierry Blaisot, Jean-Bernard CORIA :09-001 CORIA :09-001.
- [112] EM El-Hannouny, S Gupta, CF Powell, S Cheong, RR Sekar, and J Wang. Time resolved x-ray measurements of diesel sprays at elevated ambient pressure. Technical report, Argonne National Laboratory (ANL), 2005.
- [113] Franz X Tanner, KA Feigl, Steve A Ciatti, Christopher F Powell, S-K Cheong, J Liu, and Jinn Wang. Structure of high-velocity dense sprays in the near-nozzle region. *Atomization and Sprays*, 16(5), 2006.
- [114] M. Klein, A. Sadiki, and J. Janicka. A digital filter based generation of inflow data for spatially developing direct numerical or large eddy simulations. *Journal of Computational Physics*, 186(2) :652 – 665, 2003.
- [115] Kamel Lounnaci, S. Idlahcen, David Sedarsky, C. Roze, Jean-Bernard Blaisot, and Francois-Xavier Demoulin. Image processing techniques for velocity, interface complexity, and droplet production measurement in the near-nozzle region of a diesel spray. *Atomization and Sprays*, 25(9) :753–775, 2015.
- [116] Goeffroy Vaudor. *Atomisation assistée par un cisaillement de l'écoulement gazeux : développement et validation*. PhD thesis, CORIA, 2015.
- [117] P-A Beau, Mia Funk, Romain Lebas, and F-X Demoulin. Applying quasi-multiphase model to simulate atomization processes in diesel engines : Modeling of the slip velocity. Technical report, SAE Technical Paper, 2005.
- [118] Pankaj Kumar, Qing Yang, Van Jones, and Leigh McCue-Weil. Coupled sph-fvm simulation within the openfoam framework. *Procedia IUTAM*, 18 :76–84, 2015.
- [119] Rodney O Fox, Frédérique Laurent, and Marc Massot. Numerical simulation of spray coalescence in an eulerian framework : direct quadrature method of moments and multi-fluid method. *Journal of Computational Physics*, 227(6) :3058–3088, 2008.
- [120] Sébastien Tanguy. *Développement d'une méthode de suivi d'interface. Applications aux écoulements diphasiques*. PhD thesis, Université de Rouen, 2004.