



HAL
open science

Modélisation eulérienne de l'interaction d'un brouillard avec un choc en régime supersonique

Gentien Marois

► **To cite this version:**

Gentien Marois. Modélisation eulérienne de l'interaction d'un brouillard avec un choc en régime supersonique. Mathématiques générales [math.GM]. INSA de Toulouse, 2018. Français. NNT : 2018ISAT0045 . tel-02194107

HAL Id: tel-02194107

<https://theses.hal.science/tel-02194107v1>

Submitted on 25 Jul 2019

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

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



THÈSE

En vue de l'obtention du **DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE**

Délivré par l'Institut National des Sciences Appliquées de
Toulouse

Présentée et soutenue par

Gentien MAROIS

Le 20 décembre 2018

**Modélisation eulérienne de l'interaction d'un brouillard avec
un choc en régime supersonique**

Ecole doctorale : **EDMITT - Ecole Doctorale Mathématiques, Informatique et
Télécommunications de Toulouse**

Spécialité : **Mathématiques et Applications**

Unité de recherche :
IMT : Institut de Mathématiques de Toulouse

Thèse dirigée par
Philippe VILLEDIEU et Julien MATHIAUD

Jury

Mme Pauline LAFITTE-GODILLON, Rapporteur
M. Philippe HELLUY, Rapporteur
M. Laurent BOUDIN, Examineur
M. Pierre FABRIE, Examineur
M. Rémi ABGRALL, Examineur
M. Philippe VILLEDIEU, Directeur de thèse
M. Julien MATHIAUD, Co-directeur de thèse
M. David HEBERT, Invité

Table des matières

Table des matières	ii
Table des figures	ix
Liste des tableaux	xv
Remerciements	xix
Introduction	i
1 Modélisation de l'écoulement gazeux	1
Nomenclature du chapitre 1	2
1.1 Choc autour d'un objet	4
1.2 Comportement de l'air à haute température	6
1.2.1 Cas d'un gaz pur diatomique	6
1.2.1.1 Degrés de liberté des molécules	6
1.2.1.2 Dissociation et ionisation	10
1.2.2 Comportement de l'air sans réaction chimique	10
1.2.3 Comportement de l'air dans le cas général	12
1.3 Équations générales des écoulements hypersoniques	14
1.3.1 Différents régimes d'écoulement	14
1.3.2 Équations de Navier-Stokes sans réaction chimique	15
1.3.2.1 Lois de comportement	16
1.3.2.2 Loi d'évolution de μ en fonction de T	16
1.3.2.3 Loi d'état	17
1.3.3 Équation de Navier-Stokes pour les mélanges de gaz réactifs	18
1.3.3.1 Liens entre les grandeurs par espèce et les grandeurs du mélange	19
1.3.3.2 Calcul de la viscosité du mélange	19
1.3.3.3 Calcul de la conductivité thermique du mélange	20
1.3.3.4 Calcul des termes de production massique des espèces	20
1.3.3.5 Calcul des termes de diffusion massique	20
1.3.4 Modèles simplifiés	21
1.3.4.1 Modèle "gaz parfait à γ constant"	21
1.3.4.2 Modèle "gaz parfait à γ variable et chimie figée"	21
1.3.4.3 Modèle "gaz parfait à γ variable et chimie infiniment rapide" dit "à l'équilibre"	22

1.4	Analyse des phénomènes physiques prépondérants dans le cas de l'interaction entre un écoulement d'air hypersonique et un obstacle	23
1.4.1	Configuration géométrique étudiée	23
1.4.2	Influence du choix du modèle sur la température	24
1.4.3	Influence du choix du modèle sur la distance de choc	28
1.4.4	Amélioration de la formule de Billig pour le calcul de la distance de choc	29
1.4.4.1	Introduction	29
1.4.4.2	Constats initiaux	30
1.4.4.3	Idée directrice	31
1.4.4.4	Construction de la formule	31
1.4.4.5	Mise en évidence de deux états asymptotiques	33
1.4.4.6	Détermination de la transition	34
1.4.4.7	Validation	35
1.5	Conclusion	39
2	Modélisation du brouillard de particules	41
	Nomenclature du chapitre 2	42
2.1	Modélisation des phénomènes physiques à l'échelle d'une particule	45
2.1.1	Forces aérodynamiques s'appliquant sur une particule	45
2.1.1.1	Bilan des forces	45
2.1.1.2	Expression du coefficient de traînée pour une sphère rigide	46
2.1.2	Échange de chaleur et de matière avec le gaz : effets thermiques s'appliquant sur une particule	51
2.1.2.1	Expression des flux thermiques reçus par une particule	51
2.1.2.2	Présentation des principaux modèles de chauffage et d'évaporation	53
2.1.2.3	Évaluation des temps caractéristiques liés aux effets thermiques	54
2.1.2.4	Évaluation du temps caractéristique des effets thermiques pour une particule solide	55
2.1.3	Caractérisation de l'interaction particules-paroi	58
2.1.4	Étude de l'influence des collisions entre les particules	59
2.1.5	Description du phénomène de fragmentation d'une particule liquide	61
2.1.5.1	Quelques modes de fragmentation	64
2.1.5.2	Temps caractéristique de breakup	64
2.1.5.3	Tailles et vitesses des fragments	65
2.2	Équation de Williams-Boltzmann associée au brouillard	68
2.2.1	Expression des termes $\Phi_{\mathbf{v}}$, Φ_d et Φ_e	69
2.2.2	Discrétisation dans l'espace des phases (\mathbf{v}_p , d_p , e_p , Ψ_p)	72
2.2.3	Équations générales du système multi-classes	77
2.2.3.1	Traitement de l'interaction particule-paroi dans le cadre du modèle multi-classes	78
2.2.3.2	Traitement des termes de rétroaction dans le cadre du modèle multi-classes	78
2.3	Conclusion	80
3	Discrétisation numérique du modèle et tests académiques de validation	81

Nomenclature du chapitre 3	82
3.1 Discrétisation du système	84
3.1.1 Discrétisation spatiale	84
3.1.1.1 Rappels généraux sur la méthode des volumes finis	84
3.1.1.2 Application au cas du système fluide-particules	89
3.1.2 Discrétisation temporelle	92
3.1.2.1 Rappels généraux sur la méthode de discrétisation temporelle des systèmes différentiels	92
3.1.2.2 Application au cas du système fluide-particules	94
3.1.3 Quelques propriétés mathématiques du schéma de discrétisation utilisé pour la phase particulaire	96
3.1.3.1 Préservation de la positivité du nombre de particules	96
3.1.3.2 Principe du maximum sur la masse des particules	97
3.1.3.3 Principe du maximum sur la vitesse des particules	98
3.1.3.4 Principe du maximum sur l'énergie et le facteur de déformation	99
3.1.4 Traitement numérique de la configuration axisymétrique	99
3.1.5 Traitement numérique des conditions aux limites	101
3.1.6 Traitement numérique des termes de rétroaction	103
3.1.6.1 Etude de la stabilité du système couplé avec relaxation	104
3.2 Résultats des tests de validation sur des configurations académiques	110
3.2.1 Cas d'épreuve #1 : Validation du traitement numérique du transport et des phénomènes thermiques	110
3.2.2 Cas d'épreuve #2 : Validation du traitement numérique du système complet	117
3.2.2.1 Présentation du cas test et des hypothèses de calcul	117
3.2.2.2 Équations du système couplé {fluide+particules}	119
3.2.2.3 Validation de la conservativité globale : calcul des conditions de sortie en fonction des conditions d'entrée	120
3.2.2.4 Validation du système global : linéarisation du système en l'absence d'effets thermiques, calcul de solutions explicites et comparaison avec les résultats obtenus par le code SDFS	122
3.2.2.5 Validation du système global : calcul de solutions explicites du système en l'absence d'effets dynamiques et comparaison avec les résultats obtenus par le code SDFS	130
3.2.3 Validation de l'implémentation numérique des conditions aux limites d'interaction particules-paroi	132
4 Modélisation de la fragmentation de particules liquides	135
Nomenclature du chapitre 4	136
4.1 Description de deux modèles de fragmentation adaptés au régime supersonique	139
4.1.1 Description du modèle de fragmentation proposé par Reinecke	140
4.1.1.1 Présentation du modèle	140
4.1.1.2 Traitement numérique du modèle de fragmentation de Reinecke	144

4.1.1.3	Validation de l'implémentation numérique du modèle de fragmentation de Reinecke	146
4.1.2	Description du modèle de fragmentation de Chauvin	149
4.1.2.1	Présentation du modèle	149
4.1.2.2	Traitement numérique du modèle de fragmentation de Chauvin	153
4.1.2.3	Validation de l'implémentation numérique du modèle de fragmentation de Chauvin	154
4.2	Mise en évidence de l'importance de la fragmentation dans la caractérisation d'un spray supersonique	156
4.2.1	Évaluation du temps caractéristique de fragmentation	156
4.2.2	Analyse des flux de masse impactant la paroi en fonction du modèle de fragmentation	157
4.3	Description des nouveaux modèles de fragmentation	160
4.3.1	Description du modèle de fragmentation dit "à deux classes"	160
4.3.1.1	Mise en exergue des limites des modèles de Reinecke et de Chauvin	160
4.3.1.2	Présentation du modèle	161
4.3.1.3	Traitement numérique du modèle à deux sections	162
4.3.2	Description du modèle multiclassés	165
4.3.2.1	Description du dispositif expérimental et présentation des principaux résultats	165
4.3.2.2	Présentation du modèle proposé	169
4.3.2.3	Formulation Eulérienne du modèle de fragmentation multiclassés	172
4.4	Conclusion	176
5	Premières applications du modèle pour la restitution d'expériences complexes d'interaction d'un brouillard avec un choc	179
	Nomenclature du chapitre 5	180
5.1	Expérience d'Alice Chauvin	182
5.1.1	Diagramme d'ondes (x,t) dans le tube à choc	183
5.1.2	Mise en évidence de trois états	185
5.1.3	Caractérisation de la pression asymptotique	188
5.1.4	Pistes d'amélioration du modèle	193
5.2	Expérience de Boeing	198
5.2.1	Présentation de l'expérience	198
5.2.2	Présentation des travaux de Hulin et Znaty [44]	199
5.2.3	Reproduction des travaux de Hulin et Znaty [44]	201
5.2.4	Étude de sensibilité	217
5.3	Conclusion	227
	Conclusion et perspectives	229
	Annexe 1	233
	Annexe 2	235

Bibliographie

237

Table des figures

1.1	Choc attaché à l'objet (gauche) ou détaché (droite) [86]	4
1.2	Choc attaché (gauche) et détaché (droite) autour d'un dièdre d'angle α . .	4
1.3	Cas d'un écoulement autour d'un objet "émoussé"	5
1.4	Degrés de liberté d'une molécule diatomique	7
1.5	Évolution des taux d'activation λ_{O_2} et λ_{N_2} en fonction de la température	8
1.6	Évolution de la composition de l'air en fonction de la température pour une pression de 1 bar [2]	13
1.7	Caractérisation du régime d'écoulement en fonction du nombre de Knudsen [2]	14
1.8	Schéma de la configuration géométrique étudiée	23
1.9	Évolution de la température pour $M_\infty = 2$	25
1.10	Évolution de la température pour $M_\infty = 14$	26
1.11	Évolution de la température pour $M_\infty = 25$	27
1.12	Évolution de la distance de choc pour différents Mach amont	28
1.13	Évolution de la distance de choc pour différents Mach amont	29
1.14	Évolution de la distance de choc en fonction du Mach amont : comparaison entre la formule de Billig, la formule de Lobb et les résultats numériques .	30
1.15	Évolution du coefficient γ en fonction de la température	32
1.16	Évolution de la distance de choc en fonction du nombre de Mach infini pour différentes températures infinies	33
1.17	Comparaison entre $\frac{\Delta_{\gamma=1.4}}{D}$, $\frac{\Delta_{\gamma=1.29}}{D}$ et leurs approximations	34
1.18	Évolution de la distance de choc en fonction du Mach infini pour $T_\infty = 50K$: comparaison entre la formule de Billig et la formule proposée	35
1.19	Évolution de la distance de choc en fonction du Mach infini pour $T_\infty = 100K$: comparaison entre la formule de Billig et la formule proposée	36
1.20	Évolution de la distance de choc en fonction du Mach infini pour $T_\infty = 200K$: comparaison entre la formule de Billig et la formule proposée	36
1.21	Évolution de la distance de choc en fonction du Mach infini pour $T_\infty = 300K$: comparaison entre la formule de Billig et la formule proposée	37
1.22	Évolution de la distance de choc en fonction du Mach infini pour $T_\infty = 400K$: comparaison entre la formule de Billig et la formule proposée	37
1.23	Évolution de la distance de choc en fonction du Mach infini pour $T_\infty =$ $500K$: comparaison entre la formule de Billig et la formule proposée . . .	38
2.1	Évolution du coefficient de traînée en fonction du Reynolds particulière pour plusieurs formules	49
2.2	Flux thermiques reçus par une particule	52

2.3	Flux thermiques reçus par une particule : comparaison des modèles de conductivité infinie et de conductivité nulle	53
2.4	Rapport entre le temps caractéristique des effets thermiques et le temps de parcours : évolution en fonction du nombre de Mach amont pour différentes hauteurs	56
2.5	Temps caractéristique des effets thermiques : évolution en fonction du nombre de Mach amont pour différentes hauteurs	57
2.6	Temps caractéristique de parcours : évolution en fonction du nombre de Mach amont pour différentes hauteurs	57
2.7	Interaction des particules avec la paroi	58
2.8	Cylindre de collision	60
2.9	Probabilité de collision : évolution en fonction de la position au niveau de la ligne d'arrêt, $\alpha = 10^{-6}$ et $d = 100\mu m$	61
2.10	Classification des différents modes de fragmentation ([61])	63
2.11	Évolution du temps de fragmentation en fonction du nombre de Weber	66
2.12	Discrétisation selon la méthode des classes (en haut) et la méthode aux sections (en bas)	77
3.1	Maillage structuré utilisé dans le cadre de l'étude	84
3.2	Description de la maille K du maillage \mathcal{Q}	85
3.3	Discrétisation de l'espace en $1D$	86
3.4	Principe l'interpolation de la méthode MUSCL	88
3.5	Algorithme de couplage entre les deux phases	103
3.6	Structure du code SDFS	110
3.7	Présentation du cas test de validation	111
3.8	Évolution du champ de vitesse horizontale de la phase particulaire. Maillage utilisé : maillage 1. Ordre de la discrétisation spatiale : ordre 1 (à gauche), ordre 2 (à droite)	112
3.9	Évolution du champ de vitesse horizontale de la phase particulaire. Maillage utilisé : maillage 2. Ordre de la discrétisation spatiale : ordre 1 (à gauche), ordre 2 (à droite)	112
3.10	Évolution du champ de vitesse horizontale de la phase particulaire. Maillage utilisé : maillage 3. Ordre de la discrétisation spatiale : ordre 1 (à gauche), ordre 2 (à droite)	113
3.11	Évolution du champ de diamètre de la phase particulaire. Maillage utilisé : maillage 3. Ordre de la discrétisation spatiale : ordre 1 (à gauche,) ordre 2 (à droite)	113
3.12	Comparaison de la trajectoire moyenne de la phase particulaire calculée avec l'approche Eulérienne et la trajectoire de la particule de référence calculée avec la méthode Lagrangienne	114
3.13	Évolution de la vitesse horizontale en fonction de x . Comparaison entre la solution Eulérienne et la solution Lagrangienne de référence	115
3.14	Champ de vitesse horizontale. Comparaison entre la solution Eulérienne (à gauche) et la solution Lagrangienne de référence (à droite)	115
3.15	Évolution de la vitesse verticale en fonction de x . Comparaison entre la solution Eulérienne et la solution Lagrangienne de référence	116
3.16	Champ de vitesse verticale. Comparaison entre la solution Eulérienne (à gauche) et la solution Lagrangienne de référence (à droite)	116

3.17	Évolution du diamètre en fonction de x . Comparaison entre la solution Eulérienne et la solution Lagrangienne de référence	117
3.18	Champ de diamètre. Comparaison entre la solution Eulérienne (à gauche) et la solution Lagrangienne de référence (à droite)	117
3.19	Présentation du deuxième cas test de validation : particules (en bleu) et fluide (en rouge) en déséquilibre à l'entrée du tube et en équilibre à la sortie	118
3.20	Évolution des densités en fonction de la position	129
3.21	Évolution des vitesses en fonction de la position	129
3.22	Évolution de la pression en fonction de la position	130
3.23	Évolution des vitesses en fonction de la position	130
3.24	Évolution des densités en fonction de la position	132
3.25	Description de la géométrie utilisée	133
3.26	Évolution des vitesses après rebond en fonction de l'angle θ : comparaison entre les résultats du code et la solution théorique	133
4.1	Classification des modes de fragmentation ([62])	139
4.2	Évolution du nombre de Weber après le choc en fonction du nombre de Mach amont et de la hauteur d'injection	140
4.3	Description de l'expérience de Reinecke [66]	141
4.4	Évolution de la particule durant sa fragmentation [67] : images obtenues par rayons X	141
4.5	Évolution de la particule durant sa fragmentation [65] : images obtenues par ombroscopie	142
4.6	Évolution de la masse de la particule durant sa fragmentation selon le modèle de Reinecke	143
4.7	Principe du modèle de Reinecke	144
4.8	Évolution de la masse le long de la ligne d'arrêt	147
4.9	Description de la géométrie étudiée	148
4.10	Évolution du flux de masse adimensionné en fonction de l'angle θ : $600\mu m$ (à gauche) et $1000\mu m$ (à droite)	149
4.11	Description du dispositif utilisé par Chauvin [13]	150
4.12	Évolution de la pression dans la chambre d'expérience : comparaison entre la simulation d'un brouillard de particules solides (en noir) et l'expérience d'un brouillard de particules liquides (en rouge) [13]	151
4.13	Principe du modèle de Chauvin	152
4.14	Évolution du diamètre des particules le long de la ligne d'arrêt	155
4.15	Évolution du flux de masse adimensionné en fonction de l'angle θ	155
4.16	Rapport entre le temps caractéristique de fragmentation et le temps de parcours : évolution en fonction du nombre de Mach amont pour différentes hauteurs	156
4.17	Évolution du flux de masse impactant la paroi en fonction de la configuration étudiée, diamètre des particules : $1\mu m$ (à gauche), $10\mu m$ (à droite)	158
4.18	Évolution du flux de masse impactant la paroi en fonction de la configuration étudiée, diamètre des particules : $100\mu m$ (à gauche), $200\mu m$ (à droite)	158
4.19	Évolution du flux de masse impactant la paroi en fonction de la configuration étudiée, diamètre des particules : $300\mu m$ (à gauche), $400\mu m$ (à droite)	158

4.20	Évolution du flux de masse impactant la paroi en fonction de la configuration étudiée, diamètre des particules : $500\mu m$ (à gauche), $600\mu m$ (à droite)	159
4.21	Évolution du flux de masse impactant la paroi en fonction de la configuration étudiée, diamètre des particules : $700\mu m$ (à gauche), $800\mu m$ (à droite)	159
4.22	Évolution du flux de masse impactant la paroi en fonction de la configuration étudiée, diamètre des particules : $900\mu m$ (à gauche), $1000\mu m$ (à droite)	159
4.23	Principe du schéma à deux classes	162
4.24	Dispositif global de la manipulation	165
4.25	Dispositif permettant de maintenir la particule	166
4.26	Évolution de la particule durant sa fragmentation : comparaison entre résultat expérimental et simulation	167
4.27	Évolution de la particule durant sa fragmentation : comparaison entre résultat expérimental et simulation	167
4.28	Évolution de la particule durant sa fragmentation : comparaison entre résultat expérimental et simulation	168
4.29	Évolution de la particule durant sa fragmentation : comparaison entre résultat expérimental et simulation	168
4.30	Évolution de la particule durant sa fragmentation : résultat expérimental pour des temps longs	169
4.31	Différentes étapes du nouveau modèle de fragmentation	169
5.1	Évolution de la pression en fonction du temps dans la chambre d'expérience à une abscisse x fixée : comparaison entre la simulation d'un brouillard de particules solides (en noir) et l'expérience réalisée avec des particules liquides (en rouge), de même taille et de même densité [13]	182
5.2	Diagramme d'ondes (x,t) basé sur les résultats numériques du code SDFS : à gauche sans particule, au milieu avec des particules solides et à droite avec des particules liquides	183
5.3	Diagramme d'ondes (x,t) théorique proposé par Chauvin [13]	184
5.4	Évolution de la pression en fonction du temps pour des particules solides de différents diamètres	185
5.5	Évolution de la pression en fonction du temps pour des particules solides de 100 et 500 microns et pour des particules liquides de 500 microns	186
5.6	Évolution de la pression et de la densité massique des particules mères et filles en fonction du temps pour des particules solides de 100 et 500 microns et pour des particules liquides de 500 microns	187
5.7	Évolution de la pression et de la densité massique en fonction du temps pour des particules solides de 100 et 500 microns et pour des particules liquides de 500 microns	188
5.8	Évolution de la pression en fonction du temps pour différents diamètres et différentes vitesses : en haut $v_f = v_m$, au milieu $v_f = (v_m + u_f)/2$, en bas $v_f = u_f$	189
5.9	Évolution de la pression en fonction du temps pour différentes vitesses et différents diamètres : en haut $d_f = 100\mu m$, au milieu $d_f = 150\mu m$, en bas $d_f = 200\mu m$	190

5.10	Évolution de la pression en fonction du temps : étude de l'influence du diamètre des particules mères après fragmentation	192
5.11	Évolution de la pression en fonction du temps : étude de l'influence du diamètre des particules filles	193
5.12	Évolution de la pression en fonction du temps : étude de l'influence du temps de fragmentation	194
5.13	Influence du coefficient de traînée sur l'évolution de la pression	195
5.14	Évolution de la pression en fonction du temps pour le couple ($d_f = 75\mu m, \alpha_v = 0.25$) et $C_D = C_D^{Eq.(5.3)}$	195
5.15	Évolution de la pression en fonction du temps pour le triplet ($\beta_{C_D} = 0.5, d_f = 80\mu m, \alpha_v = 0$)	197
5.16	Description de l'expérience réalisée à Boeing	198
5.17	Observation expérimentale de la déformation du choc due à la présence de particules : [17] (à gauche) et [25] (à droite)	199
5.18	Résultats de simulations effectuées par Hulin et Znaty [44]	199
5.19	Impact d'une bille de silice sur un mur d'alliage de titane (Ti-6Al-4V), $t = 0$ (à gauche), $t = 200ns$ (à droite)	201
5.20	Évolution de la vitesse massique moyenne des particules en fonction du temps	202
5.21	Gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 0$	203
5.22	Gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 880\mu s$	203
5.23	Gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 911\mu s$	204
5.24	Gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 942\mu s$	204
5.25	Gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 973\mu s$	205
5.26	Gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 1004\mu s$	205
5.27	Gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 1066\mu s$	206
5.28	Gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 1097\mu s$	206
5.29	Gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 1128\mu s$	207

5.30	Pour chaque image : gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 0 \mu s$	208
5.31	Pour chaque image : gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 880 \mu s$	209
5.32	Pour chaque image : gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 911 \mu s$	210
5.33	Pour chaque image : gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 942 \mu s$	211
5.34	Pour chaque image : gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 973 \mu s$	212
5.35	Pour chaque image : gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 1004 \mu s$	213
5.36	Pour chaque image : gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 1066 \mu s$	214
5.37	Pour chaque image : gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 1097 \mu s$	215
5.38	Pour chaque image : gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 1128 \mu s$	216
5.39	Étude de sensibilité des paramètres ($\epsilon_{tot}, \alpha_{turb}$)	218
5.40	Évolution de la vitesse des particules après rebond : $\epsilon_{tot} = 0.04$ (à gauche), $\epsilon_{tot} = 0.06$ (à droite)	219
5.41	Évolution de la vitesse des particules après rebond : $\epsilon_{tot} = 0.04$ (à gauche), $\epsilon_{tot} = 0.06$ (à droite)	219
5.42	Évolution de la vitesse des particules après rebond : $\epsilon_{tot} = 0.04$ (à gauche), $\epsilon_{tot} = 0.06$ (à droite)	220
5.43	Évolution de la vitesse des particules après rebond : $\epsilon_{tot} = 0.04$ (à gauche), $\epsilon_{tot} = 0.06$ (à droite)	220
5.44	Évolution de la vitesse des particules après rebond : $\epsilon_{tot} = 0.04$ (à gauche), $\epsilon_{tot} = 0.06$ (à droite)	221
5.45	Pour chaque image : gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 1020 \mu s$	222
5.46	Pour chaque image : gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 1035 \mu s$	223
5.47	Pour chaque image : gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 1050 \mu s$	224

-
- 5.48 Pour chaque image : gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 1344 \mu s$ 225
- 5.49 Pour chaque image : gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 1344 \mu s$ 226

Liste des tableaux

1.1	État du gaz avant et après le choc	5
1.2	Température de dissociation à $p = 1 atm$	10
1.3	Nombre de Mach amont	24
1.4	Valeurs de référence utilisées pour les simulations	24
1.5	Domaine de validité de la formule proposée et de celle de Billig	38
3.1	Caractéristiques des différents maillages utilisés	111
3.2	Conditions initiales du calcul pour les deux phases	111
3.3	Conditions initiales du calcul pour les deux phases	112
3.4	Calcul des conditions de sortie : comparaison entre les solutions théoriques et les résultats du code	121
3.5	Calcul des conditions de sortie : comparaison entre les solutions théoriques et les résultats du code	123
3.6	Conditions entrée de la simulation	128
3.7	Conditions entrée de la simulation	129
3.8	Conditions entrée de la simulation	131
4.1	Caractéristiques des expériences de Reinecke	142
4.2	Conditions initiales de l'expérience de Chauvin [13]	151
4.3	Valeurs de référence utilisées pour les simulations	157
4.4	Caractéristiques des différentes configurations utilisées	157
4.5	Caractéristiques des différents modèles proposés	161
4.6	Caractéristiques des différents modèles proposés	162
5.1	Couples (d_f, α_v) idéaux correspondant aux différents coefficients de traînée	196
5.2	Caractéristiques de l'expérience de Boeing	198
5.3	Valeurs des paramètres permettant de modéliser le comportement des par- ticules à la paroi et l'érosion de la paroi	202

Remerciements

Me voici donc devant l'écriture des remerciements, moment le plus plaisant de la rédaction car il signifie que c'est fini !! Néanmoins c'est un exercice délicat puisqu'il ne faut oublier personne et être le plus exhaustif possible. Je vais essayer ...

Tout d'abord, je voudrais adresser mes remerciements à mes deux rapporteurs Pauline LAFFITE-GODILLON et Philippe HELLUY. Je remercie aussi les membres de mon jury, le président Rémi ABGRALL, Pierre FABRIE, Laurent BOUDIN et David HEBERT. Merci pour vos remarques et vos commentaires qui ont enrichi mon manuscrit. Merci également d'avoir fait le déplacement à Bordeaux à 4 jours de Noël.

Je tiens ensuite tout particulièrement à remercier mon directeur de thèse Philippe VILLEDIEU pour m'avoir accompagné durant ces trois années, avoir toujours été présent pour répondre à mes questions et m'aider. Même le dimanche à 23 heures !! Tes nombreuses connaissances en mathématiques et en physique m'ont permis de toujours aller dans la bonne direction. Je souhaite à toute personne de t'avoir en directeur de thèse car tu es une belle personne, avec de grandes qualités scientifiques et humaines.

Je remercie aussi mon co-directeur Julien MATHIAUD pour m'avoir accompagné au quotidien durant ces trois années. Merci de m'avoir initié aux « vraies mathématiques théoriques » ... Je ne suis pas près d'oublier cette preuve d'unicité de solution en temps petit dans des boules de Sobolev.

Merci à tous les personnels du CEA qui m'ont accueilli. Merci aux différents chefs et leurs adjoints Xavier, Pierre-Henri, Nicolas, David, Ludovic et Céline. Merci aux membres du laboratoire pour leur accueil et leur aide tout au long de ces trois années, en particulier Isabelle, Fred, Marina et Jean. Merci enfin aux deux supers secrétaires Anne-Pascale et Martine pour avoir toujours trouvé des solutions à mes problèmes !

Merci à tous les non-permanents que j'ai côtoyés : Jordan, Simon, Pierre, Alexia, Thomas, l'autre Pierre, Florian, Jeff, Vincent et Nicolas. Une mention spéciale pour mes co-bureaux de toujours, qui m'ont donné envie de venir tous les jours au travail : Rémi (avec un i ...) et Bertrand. Merci à ceux qui m'ont accompagné durant mes conférences

et mes formations, qui ont participé à l'expédition « brame du cerf » et qui m'ont aidé à relire ma thèse. Merci enfin à tous les foteux du lundi soir, en particulier à Alain, Patrick, Nicolas et Raphael. Merci de m'avoir laissé marquer un but ;-)

Je remercie mes amis et mes parents, mes sœurs Laure-Anne, Adeline, Solène et Ingrid et mon frère Guilhem pour leur soutien permanent depuis tant d'années. Merci d'avoir accepté de ne plus (trop) me voir pendant ces six derniers mois!!

Un infini merci enfin à Victoria pour avoir été à mes côtés durant ces trois années. Merci de m'avoir supporté, aidé et soutenu. Cette année aura été difficile pour nous deux mais on a réussi :-)

Introduction

Les brouillards sont un type particulier d'écoulement diphasique dans lesquels une phase (phase particulaire) est dispersée sous forme de fines particules au sein d'une phase continue liquide ou gazeuse (appelée phase porteuse ou phase fluide). La fraction volumique de la phase dispersée est généralement très faible devant celle de la phase porteuse.

Ces écoulements ont fait et font encore l'objet de nombreuses recherches en particulier dans les domaines industriels (moteurs [75, 91, 92], lutte contre les incendies [31, 47, 57]) ou recherche médicale [30, 56]).

Plus récemment, deux nouveaux champs d'application sont apparus, mettant en jeu des brouillards. Le premier concerne l'utilisation d'un brouillard de particules liquides pour atténuer une onde de choc (due par exemple à une explosion accidentelle). Cette possibilité a été démontrée expérimentalement [7, 12, 48] et a également fait l'objet d'études d'un point de vue numérique [11, 13]. Le second est lié à l'exploration planétaire. En effet, les récentes avancées technologiques permettent d'envoyer de plus en plus de sondes pour explorer le sol de la planète Mars. Or, sur cette planète, des phénomènes de tempête de sable sont susceptibles de gravement endommager les protections thermiques des sondes lors de leur rentrée dans l'atmosphère, pouvant mener à leur destruction [42, 43].

Dans ces deux nouveaux domaines d'application, les particules constituant le brouillard interagissent avec une onde de choc : instationnaire dans le premier cas, stationnaire et détachée devant la sonde dans le second.

Etant intéressé par ces deux champs d'application, le CEA a décidé de mettre en place un programme de simulation permettant de décrire l'interaction d'un brouillard, de particules solides ou liquides, avec un choc. C'est dans ce contexte que s'inscrit cette thèse.

Pour la modélisation numérique des brouillards, il existe dans la littérature deux approches appelées respectivement approche Eulérienne-Lagrangienne et approche Eulérienne-Eulérienne.

Dans le cas de la première approche, la phase fluide est traitée avec les équations de Navier-Stokes et la phase particulaire avec une approche Lagrangienne ([18, 73]). Elle consiste à résoudre les équations du mouvement d'un ensemble de particules (appelées particules numériques) statistiquement représentatives de l'ensemble des particules constituant le brouillard. Cette approche est simple à mettre en œuvre et permet de prendre en compte facilement la physique à l'échelle des particules, mais elle est coûteuse en temps de calcul et mal adaptée au calcul massivement parallèle. Dans le cas de la seconde approche, la phase fluide est toujours modélisée avec les équations de Navier-Stokes, mais cette fois la phase particulaire est traitée comme un fluide continu à l'aide d'un système d'équations Eulérien du même type que celui utilisé pour décrire la phase porteuse; d'où l'appellation d'approche Eulérienne-Eulérienne [73]. Le nombre d'équations à résoudre n'est plus dépendant du nombre de particules présentes dans le brouillard (contrairement au cas de la première approche). A précision donnée, cette seconde approche est plus efficace, en particulier sur les calculateurs parallèles car l'équilibre de la charge entre les processeurs est simple à réaliser lors du découpage du maillage. Le CEA disposant de ce type de calculateurs, c'est donc naturellement cette approche qui a été privilégiée dans le cadre de cette thèse. Malgré tout, comme nous le verrons, elle nécessite plus d'hypothèses de modélisation que la méthode Eulérienne-Lagrangienne et ne permet donc pas de décrire des situations aussi générales.

L'objectif de la thèse était, dans un premier temps, de développer un modèle de type Eulérien-Eulérien permettant de décrire l'interaction d'un brouillard avec un choc détaché et, dans un second temps, d'intégrer ce modèle au sein d'un code d'aérodynamique du CEA-CESTA dédié à la simulation des écoulements supersoniques.

Le modèle devait permettre de prendre en compte la rétroaction des particules sur l'écoulement, en particulier sur l'onde de choc. Cette rétroaction pouvant conduire, comme nous le verrons, au déclenchement d'une instabilité ayant été observée expérimentalement [17, 25]. Le plan du mémoire est divisé en cinq parties.

Le premier chapitre est consacré à la modélisation du gaz seul en régime d'écoulement supersonique, sur une large gamme de nombres de Mach. Dans un premier temps, nous rappelons le comportement physique de l'air à haute température et les équations permettant de le modéliser. Dans un second temps, nous montrons les résultats d'une étude sur les effets de hautes températures sur la distance entre un obstacle (sonde) plongé dans l'air et le choc détaché. Au cours de cette étude, nous avons été amenés à développer une formule originale permettant de calculer explicitement la distance de choc d'un écoulement supersonique autour d'une sphère, afin de généraliser la formule classique de Billig [5] pour des nombres de Mach élevés. Cette nouvelle formule a l'intérêt d'être entièrement explicite (ce qui permet un calcul très rapide) et d'être basée sur une analyse

théorique des phénomènes physiques dans la zone post-choc (contrairement à la formule de Billig).

Le deuxième chapitre est consacré à la dérivation du système d'équations eulériennes utilisé dans la suite de la thèse pour modéliser la phase particulaire. La première étape consiste à analyser et modéliser les phénomènes physiques élémentaires mis en jeu à l'échelle d'une particule, dans le cas particulier où l'écoulement porteur est supersonique : force de traînée, échanges de chaleur et de masse entre le fluide et la particule, fragmentation, interaction avec les parois, etc . . . Le passage de l'échelle mésoscopique à l'échelle macroscopique se fait *via* l'équation de Williams-Boltzmann [92], qui permet de décrire l'évolution du brouillard d'un point de vue statistique par l'intermédiaire de la densité de particules dans l'espace des phases. Enfin, le modèle final est obtenu en écrivant formellement les équations vérifiées par certains moments de la fonction de distribution par rapport aux variables internes (à l'exception de la variable taille) et en présupposant une forme particulière pour celle-ci afin de fermer le problème. Cependant la taille des particules ayant une influence majeure sur les phénomènes physiques mis en jeu, leur taille moyenne (moment d'ordre 1) n'est pas suffisante pour décrire correctement le comportement du brouillard. Il est donc préférable de conserver dans le modèle le caractère polydispersé du brouillard. Pour cela, nous avons choisi d'utiliser une méthode d'échantillonnage de la variable taille (généralement appelée « méthode des classes ») [52]. Concrètement, cette méthode consiste à écrire N systèmes eulériens identiques (un par classe de particules) couplés par l'intermédiaire du modèle de fragmentation et du modèle d'interaction particules-paroi.

Dans le troisième chapitre, nous présentons la méthode numérique adoptée pour discrétiser le modèle associé à la phase particulaire, ainsi que les résultats des tests de validation effectués. Afin de pouvoir facilement intégrer les nouveaux développements dans le code CEA existant, nous avons choisi une approche volumes finis avec un schéma d'intégration temporelle semi-implicite (avec pas de temps local). Nous montrons que le schéma numérique retenu préserve (pour chaque classe et sous condition CFL) la positivité de la concentration massique de particules ainsi que le principe du maximum sur la vitesse, le diamètre, l'énergie interne et le paramètre de forme. Concernant le traitement des termes sources liés à la rétroaction des particules sur le fluide porteur, nous avons préféré choisir une méthode de couplage explicite avec relaxation qui a l'avantage d'être totalement non-intrusive vis-à-vis du solveur existant associé à la phase gazeuse. Nous en analysons la stabilité numérique dans le cas d'un problème plus simple que celui traité dans cette thèse mais de structure similaire, ce qui nous permet d'établir un critère pour le choix du paramètre de relaxation.

Le quatrième chapitre est dédié à la modélisation de la fragmentation. Nous commençons par prouver, par une analyse des temps caractéristiques des différents phénomènes physiques en jeu que les phénomènes de fragmentation jouent un rôle prépondérant dans le cas de l'interaction d'un brouillard de particules liquides avec un écoulement supersonique. Nous présentons et comparons ensuite deux modèles simplifiés de la littérature (modèles de Reinecke [65–67] et de Chauvin [11–13]), pour prendre en compte ce phénomène. Ayant montré que ces modèles présentent des limitations théoriques importantes, nous en proposons deux nouveaux afin de remédier, au moins en partie, aux principaux problèmes identifiés. Le premier est une extension relativement simple des modèles de Reinecke et Chauvin. Le second est original et nettement plus complexe, et s'appuie sur des résultats de simulations numériques directes et d'expériences récentes réalisées à l'institut P' de Poitiers. Dans le cadre de la thèse, seul le premier modèle a été implémenté dans le code de calcul CEA.

Enfin, le cinquième et dernier chapitre est consacré à la simulation d'expériences complexes de la littérature, afin de vérifier si le modèle et la méthodologie numérique retenus permettent de restituer les résultats observés. Deux expériences particulièrement intéressantes sur le plan physique ont été sélectionnées. La première, réalisée par Chauvin [11–13] dans les années 2010 à l'aide d'un tube à choc, porte sur l'interaction d'une onde de choc instationnaire avec un brouillard de particules liquides. Les phénomènes de fragmentation y jouent un rôle majeur sur l'évolution temporelle de la pression, mesurée en différents points du brouillard après le passage du choc. Nous montrons que, pour un paramétrage bien choisi, le modèle proposé permet de restituer le comportement observé et nous proposons de nouvelles pistes d'explication pour certains résultats expérimentaux. La seconde expérience a été réalisée dans la soufflerie supersonique de Boeing [17, 25] dans les années 1970. Elle concerne l'écoulement supersonique d'un brouillard de particules solides autour d'une sphère. Les résultats expérimentaux mettent en évidence un phénomène surprenant : la présence de particules provoque une déformation instationnaire importante de l'onde de choc détachée en amont de l'obstacle, en particulier de la ligne d'arrêt. Nous montrons que le modèle permet de reproduire (au moins qualitativement) les instabilités observées à condition de tenir compte non seulement des particules réémises lors des impacts sur la paroi de la sphère, mais également de la génération de turbulence par les particules (*via* un modèle paramétré). Nous confirmons ainsi les premiers résultats numériques obtenus dans les années 1990 par Hulin et Znaty [44] avec une approche Eulerienne-Lagrangienne et un modèle similaire.

Chapitre 1

Modélisation de l'écoulement gazeux

Sommaire

Nomenclature du chapitre 1	2
1.1 Choc autour d'un objet	4
1.2 Comportement de l'air à haute température	6
1.2.1 Cas d'un gaz pur diatomique	6
1.2.2 Comportement de l'air sans réaction chimique	10
1.2.3 Comportement de l'air dans le cas général	12
1.3 Équations générales des écoulements hypersoniques	14
1.3.1 Différents régimes d'écoulement	14
1.3.2 Équations de Navier-Stokes sans réaction chimique	15
1.3.3 Équation de Navier-Stokes pour les mélanges de gaz réactifs . .	18
1.3.4 Modèles simplifiés	21
1.4 Analyse des phénomènes physiques prépondérants dans le cas de l'interaction entre un écoulement d'air hypersonique et un obstacle	23
1.4.1 Configuration géométrique étudiée	23
1.4.2 Influence du choix du modèle sur la température	24
1.4.3 Influence du choix du modèle sur la distance de choc	28
1.4.4 Amélioration de la formule de Billig pour le calcul de la distance de choc	29
1.5 Conclusion	39

Nomenclature du chapitre 1

Lettres romanes		Unité
c_p	Capacité thermique massique à pression constante du fluide	$m.s^{-2}.K^{-1}$
D	Diamètre du quart de sphère étudié	m
e	Energie interne par unité de masse du fluide	$m^2.s^{-2}$
E	Energie totale par unité de masse du fluide	$m^2.s^{-2}$
\mathbf{g}	Forces massiques extérieures	$m.s^{-2}$
h_p	Constante de Planck	$kg.m^2.s^{-1}$
k_B	Constante de Boltzmann	$kg.m^2.s^{-2}.K^{-1}$
M_i	Masse molaire de l'espèce chimique i	$kg.mol^{-1}$
\mathcal{N}_A	Nombre d'Avogadro	mol^{-1}
P	Pression du fluide	$kg.m^{-1}.s^{-2}$
\mathbf{q}	Flux de chaleur	$kg.s^{-3}$
R	Rayon du quart de sphère étudié	m
T	Température du fluide	K
\mathbf{u}	Vitesse du fluide	$m.s^{-1}$
Lettres grecques		
Δ	Distance choc-point d'arrêt	m
λ	Conductivité thermique du fluide	$kg.m^{-1}.s^{-3}.K^{-1}$
μ	Viscosité dynamique du fluide	$kg.m^{-1}.s^{-1}$
ρ	Densité du fluide	$kg.m^{-3}$
Σ	Tenseur des contraintes visqueuses	$kg.m^{-1}.s^{-2}$

Nombres sans dimension

K_n Nombre de Knudsen

M Nombre de Mach

Pr Nombre de Prandtl

γ Indice adiabatique du fluide

L'objectif de la thèse est de modéliser le comportement d'un brouillard de particules et son interaction avec un choc détaché, choc qui est caractéristique des écoulements supersoniques. Au cours de ce premier chapitre, nous allons effectuer des rappels sur les écoulements supersoniques et le comportement des gaz, à haute température. Nous nous limiterons volontairement à des températures inférieures à quelques milliers de K . Les notions de gaz réel et de gaz hors équilibre chimique seront rappelées. Ce chapitre n'a pas vocation à être exhaustif et nous renvoyons à [2, 10, 21] pour plus de détails. Dans cette partie, nous ne traiterons donc que la phase fluide, et non la phase particulaire. C'est pourquoi nous omettrons volontairement l'indice f , qui désignera le fluide dans la suite du manuscrit.

1.1 Choc autour d'un objet

Lorsqu'un écoulement supersonique rencontre un objet, une onde de choc se crée. En fonction de la géométrie de l'objet, le choc peut-être attaché ou détaché (cf. Fig. 1.1).

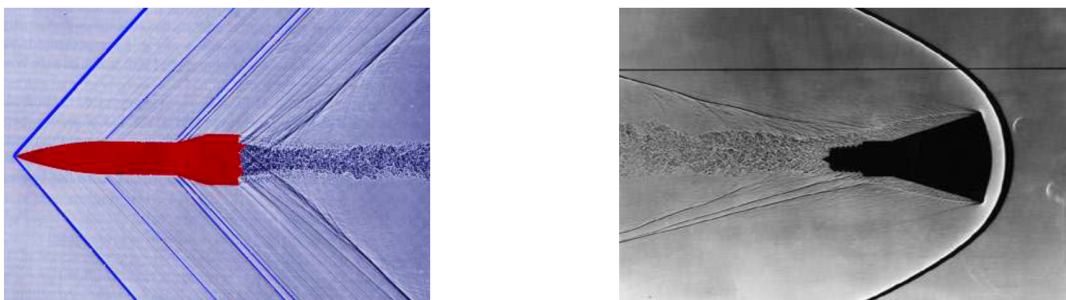


FIGURE 1.1 – Choc attaché à l'objet (gauche) ou détaché (droite) [86]

Prenons l'exemple d'un écoulement arrivant sur un dièdre d'angle α (cf. Fig. 1.2).

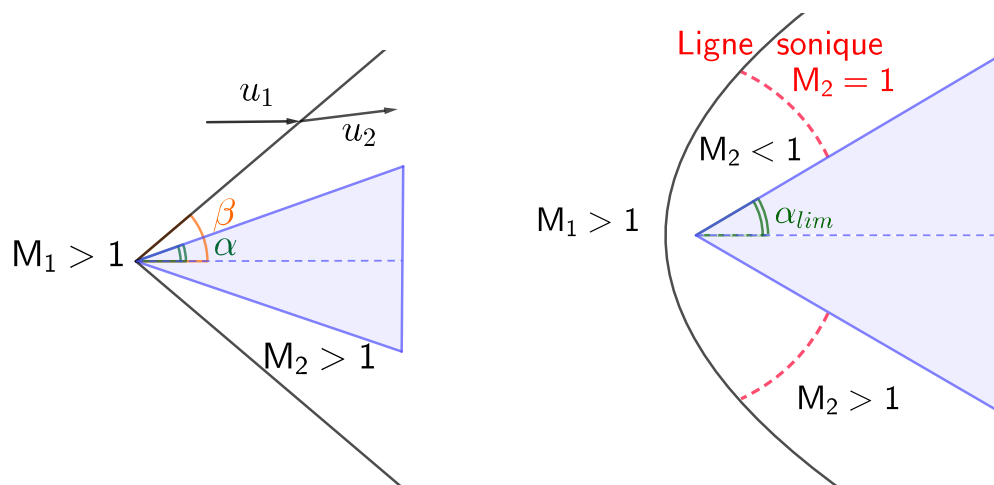


FIGURE 1.2 – Choc attaché (gauche) et détaché (droite) autour d'un dièdre d'angle α

Les relations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie, nous permettent d'écrire le système suivant :

$$\begin{cases} \rho_1 u_1 \sin(\beta) = \rho_2 u_2 \sin(\beta - \alpha) \\ u_1 \cos(\beta) = u_2 \cos(\beta - \alpha) \\ p_1 + \rho_1 u_1^2 \sin^2(\beta) = p_2 + \rho_2 u_2^2 \sin^2(\beta - \alpha) \\ h_1 + \frac{u_1^2}{2} = h_2 + \frac{u_2^2}{2} \end{cases} \quad (1.1)$$

où ρ , u , p et h désignent respectivement la densité, la vitesse, la pression et l'enthalpie du fluide. Les indices 1 correspondent aux valeurs avant choc, tandis que les indices 2 à celles après choc. L'angle du choc est noté β . Lorsque l'angle du dièdre α est trop important, ce système n'admet plus de solution. Il existe un angle α_{lim} au delà duquel le choc devient détaché. Dans le cas d'un objet "émoussé" le choc est toujours détaché. Dans la suite du manuscrit, nous étudierons le cas des objets émoussés et appellerons la zone entre le choc et l'objet la zone 'post-choc'. L'écoulement dans cette zone est composé d'une poche subsonique, près de la ligne d'arrêt, et de deux zones supersoniques de part et d'autre (cf. Fig. 1.3).

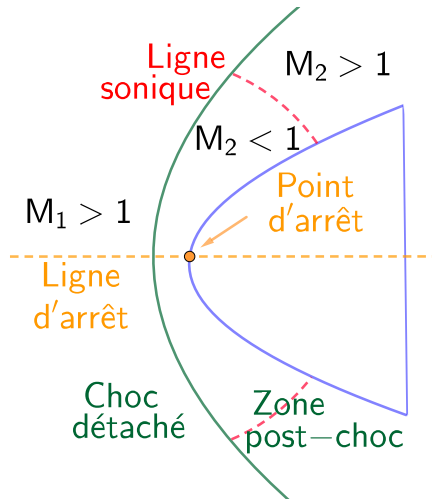


FIGURE 1.3 – Cas d'un écoulement autour d'un objet "émoussé"

Dans la zone post-choc, et en particulier dans la poche subsonique, la vitesse chute fortement (avec une vitesse nulle au niveau du point d'arrêt). Par conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie, le gaz en zone post-choc se trouve très fortement modifié : il est comprimé, sa pression ainsi que sa température augmentent.

	Avant le choc	Dans la zone post-choc
Vitesse	Importante	Faible
Pression	Faible	Importante
Température	Basse	Haute

TABLE 1.1 – État du gaz avant et après le choc

Dans la suite du manuscrit le gaz étudié sera de l'air.

1.2 Comportement de l'air à haute température

Une augmentation brutale de la température modifie les propriétés physiques et chimiques de l'air. Effectivement, les molécules de gaz peuvent alors se mettre à vibrer, à se dissocier, voire même à s'ioniser. Des réactions chimiques peuvent aussi avoir lieu. Dans la littérature, il y a souvent un abus de langage entre les effets de haute température et les effets de gaz réels. En effet, les premières observations à haute température ayant été faites lors de rentrées atmosphériques avec de l'air 'réel' (et non en laboratoire), le terme 'gaz réel' a été utilisé. Néanmoins, comme il est rappelé dans [2], la définition d'un gaz réel est liée aux forces intermoléculaires et non à la température du gaz : un gaz est dit parfait lorsque les forces intermoléculaires peuvent être négligées, il est dit réel sinon.

Dans la suite, nous utiliserons l'appellation 'effets de haute température'. Ces effets sont multiples. Il est néanmoins possible de les regrouper en trois catégories :

- les effets dus à l'activation des degrés de liberté internes des molécules,
- les effets dus à la dissociation et à l'ionisation,
- les effets dus aux réactions chimiques.

Afin de faciliter la compréhension, nous commencerons dans un premier temps par étudier le cas d'un gaz pur diatomique. Ensuite, nous aborderons celui de l'air sans réaction chimique et nous terminerons par le cas complet de l'air avec réactions chimiques.

1.2.1 Cas d'un gaz pur diatomique

1.2.1.1 Degrés de liberté des molécules

Commençons par l'effet de la température sur les degrés de liberté des molécules. Pour cela, considérons un gaz constitué de N molécules diatomiques X_2 . Ces molécules interagissent entre elles (collisions, forces de Van der Waals, ...) et possèdent une énergie moyenne ϵ . D'après la mécanique quantique, les valeurs d'énergies possibles pour une molécule donnée sont des valeurs discrètes, elles sont dites "quantifiées". A la suite des collisions, une molécule peut échanger de l'énergie avec les autres molécules et peut accéder à des niveaux d'énergie supérieurs. Ces niveaux sont reliés aux degrés de liberté de la molécule. Une molécule X_2 possède trois types de degrés de liberté (cf. Fig. 1.4) associés respectivement aux mouvements de :

- translation (trois degrés de liberté),
- rotation (deux degrés de liberté),
- vibration (deux degrés de liberté correspondant à la distance et la vitesse relative des atomes).

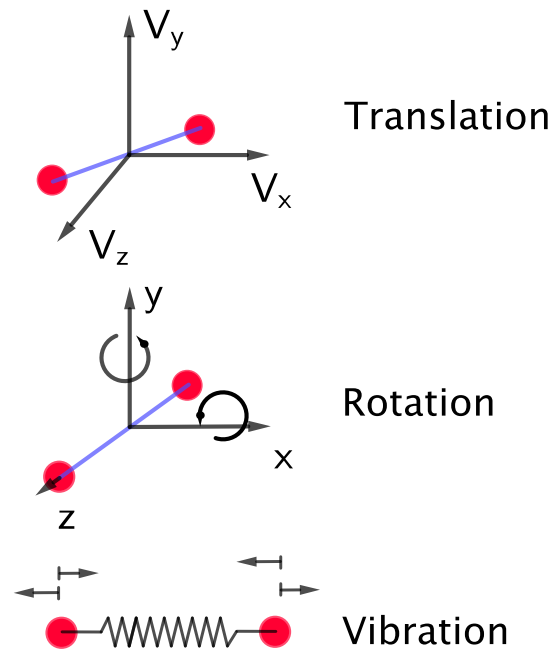


FIGURE 1.4 – Degrés de liberté d'une molécule diatomique

La constante de Boltzmann k_B permet de faire le lien entre degrés de liberté et énergie moyenne d'une molécule à l'équilibre thermique. En effet, si une molécule possède d degrés de liberté totalement activés (notion qui sera abordée dans la partie suivante), son énergie moyenne vaut alors :

$$\epsilon = \frac{d}{2} k_B T \quad (1.2)$$

L'activation de l'ensemble des degrés de liberté et l'équipartition de l'énergie sont des conséquences des collisions intermoléculaires. Le nombre de collisions étant relié à la température, l'activation des degrés de liberté l'est aussi. Au zéro absolu ($T=0K$), la molécule se trouve dans son état fondamental et aucun degré n'est activé. Les premiers degrés qui s'activent sont ceux associés à la translation et à la rotation. Ceux-ci sont totalement activés dès que la température dépasse une dizaine de K . De ce fait, dans ce manuscrit, ils sont toujours considérés comme totalement activés. Les énergies de translation ϵ_{trans} et de rotation ϵ_{rot} valent alors :

$$\begin{aligned} \epsilon_{trans} &= \frac{3}{2} k_B T \\ \epsilon_{rot} &= k_B T \end{aligned} \quad (1.3)$$

Les degrés de vibration commencent à être activés à des températures plus élevées et nécessitent de très hautes températures pour l'être entièrement. Afin d'illustrer ce phénomène nous définissons le niveau d'activation de la vibration, noté λ_{vib} , comme le rapport entre l'énergie de vibration et l'énergie de vibration lorsque celle-ci est totalement activée. Le modèle de l'oscillateur harmonique est utilisé pour représenter les mouvements des atomes dus à la vibration. Il permet d'exprimer l'énergie de vibration ϵ_{vib} en fonction de la fréquence de vibration des molécules ν_{vib} , ou de leur température de vibration T_{vib} :

$$\epsilon_{vib} = \frac{(T_{vib}/T) k_B T}{\exp(T_{vib}/T) - 1} \quad (1.4)$$

avec

$$T_{vib} = \frac{h_p \nu_{vib}}{k_B} \quad (1.5)$$

où h_p désigne la constante de Planck.

D'où la définition de λ_{vib}

$$\begin{aligned} \lambda_{vib} &= \frac{\epsilon_{vib}}{k_B T} = \frac{(T_{vib}/T) k_B T}{\exp(T_{vib}/T) - 1} \frac{1}{k_B T} \\ &= \frac{(T_{vib}/T)}{\exp(T_{vib}/T) - 1} \end{aligned} \quad (1.6)$$

Nous traçons ci-dessous (cf. Fig. 1.5) l'évolution de λ_{vib} pour une molécule de dioxygène et une molécule de diazote. Les températures de vibration sont respectivement de 2275K et 3395K [10].

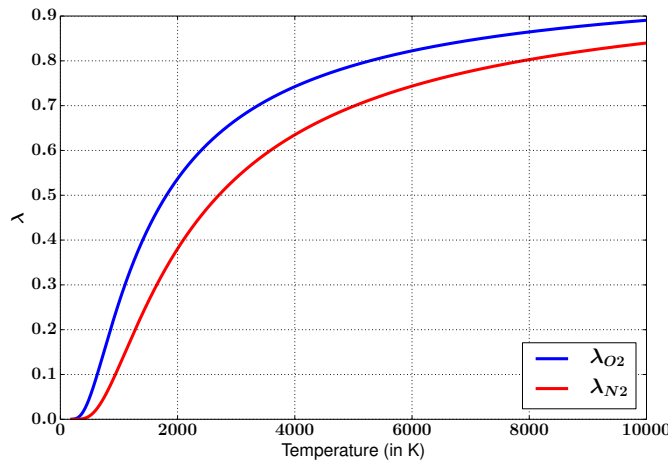


FIGURE 1.5 – Evolution des taux d'activation λ_{O_2} et λ_{N_2} en fonction de la température

Comme nous pouvons le voir, la vibration commence à devenir non négligeable pour des températures aux alentours de 500K. Lorsque la température atteint les 10000K, la vibration n'est toujours pas totalement activée :

$$T = 10000 \Rightarrow \lambda_{O_2} < 0.9$$

$$T = 10000 \Rightarrow \lambda_{N_2} < 0.85$$

Le dernier type de degré de liberté d'une molécule ne concerne pas ses atomes mais ses électrons. En effet, lorsque la température continue d'augmenter, les électrons peuvent accéder à des orbites plus lointaines ce qui fait varier leur énergie potentielle et cinétique. Cette différence d'énergie est appelée énergie électronique ϵ_{el} . Nous ne détaillerons pas ici son expression. L'énergie moyenne d'une molécule ϵ s'écrit donc :

$$\underbrace{\epsilon}_{\substack{\text{Énergie totale moyenne} \\ \text{d'une molécule}}} = \underbrace{\frac{3}{2}k_B T}_{\substack{\text{Énergie} \\ \text{de translation}}} + \underbrace{k_B T}_{\substack{\text{Énergie} \\ \text{de rotation}}} + \underbrace{\frac{(T_{vib}/T)}{\exp(T_{vib}/T) - 1} k_B T}_{\substack{\text{Énergie} \\ \text{de vibration}}} + \underbrace{\epsilon_{el}}_{\substack{\text{Énergie} \\ \text{électronique}}}$$

Dans le manuscrit, étant données les températures et les applications visées, l'énergie électronique ne sera pas prise en compte.

Remarque : la mise en vibration est un phénomène résultant des collisions. Or, celles-ci mettent un certain temps à se produire. Lorsque le gaz est chauffé brutalement, l'énergie de vibration ne s'active pas instantanément. Il en résulte un déséquilibre entre les énergies de translation-rotation et de vibration. Ce phénomène ne sera pas abordé dans le manuscrit et nous renvoyons à [2, 10] pour plus de détails.

1.2.1.2 Dissociation et ionisation

Dans le premier paragraphe, nous avons uniquement abordé les effets de la température sur l'énergie moyenne des molécules. A haute température, les molécules peuvent aussi se dissocier :



Le processus de dissociation est un processus non-instantané. Dans le tableau 1.2 ci-dessous, nous rappelons les températures de début et de fin de dissociation. Ces températures sont données pour les molécules de dioxygène et de diazote à une pression de 1 atm ([2]).

Molécule	Température de début de dissociation	Température de fin de la dissociation
O_2	2500 K	4000 K
N_2	4000K	9000 K

TABLE 1.2 – Température de dissociation à $p = 1 atm$

L'ionisation, quant à elle, est le processus par lequel une molécule perd un électron.



Les phénomènes d'ionisation se produisent pour des températures de 9000K dans le cas de l'air, à $p = 1 atm$.

La composition d'un gaz qui se dissocie ou s'ionise s'obtient en considérant les différentes réactions chimiques. Il faut alors utiliser les principes usuels des réactions chimiques (voir la partie 1.2.3, page 12 sur les réactions chimiques de l'air).

1.2.2 Comportement de l'air sans réaction chimique

Nous ferons l'approximation d'un air composé à 21% de dioxygène et à 79% de diazote. Le comportement de celui-ci s'obtient alors à partir du comportement de ces deux types de molécules. L'énergie d'une mole $\tilde{\epsilon}$ s'obtient en multipliant l'énergie moyenne d'une molécule ϵ par le nombre d'Avogadro $\mathcal{N}_A = 6.02 \cdot 10^{23} mol^{-1}$:

$$\begin{array}{ccccccc}
 \underbrace{\tilde{e}} & = & \underbrace{\frac{3}{2} \mathcal{R} T} & + & \underbrace{\mathcal{R} T} & + & \underbrace{\frac{(T_{vib}/T)}{\exp(T_{vib}/T) - 1} \mathcal{R} T} \\
 \text{Énergie} & & \text{Énergie} & & \text{Énergie} & & \text{Énergie} \\
 \text{d'une mole} & & \text{de translation} & & \text{de rotation} & & \text{de vibration}
 \end{array}$$

où

$$\mathcal{R} = k_B \mathcal{N}_A \quad (1.9)$$

Pour un mélange de deux espèces diatomiques comme l'air, il faut prendre en compte les fractions massiques c_{O_2} et c_{N_2} de chaque espèce. Pour cela, commençons par définir r_{O_2}, r_{N_2} les constantes spécifiques de O_2 et N_2 :

$$r_{O_2} = \frac{\mathcal{R}}{M_{O_2}} \quad r_{N_2} = \frac{\mathcal{R}}{M_{N_2}} \quad (1.10)$$

L'énergie massique de l'air e s'écrit alors comme la moyenne pondérée des énergies massiques :

$$e_{air} = c_{O_2} e_{O_2} + c_{N_2} e_{N_2} \quad (1.11)$$

$$e_{air} = \frac{5}{2} r_{air} T + \frac{c_{O_2} r_{O_2} T_{vib}^{O_2}}{\exp(T_{vib}^{O_2}/T) - 1} + \frac{c_{N_2} r_{N_2} T_{vib}^{N_2}}{\exp(T_{vib}^{N_2}/T) - 1} + e_{el}^{air}$$

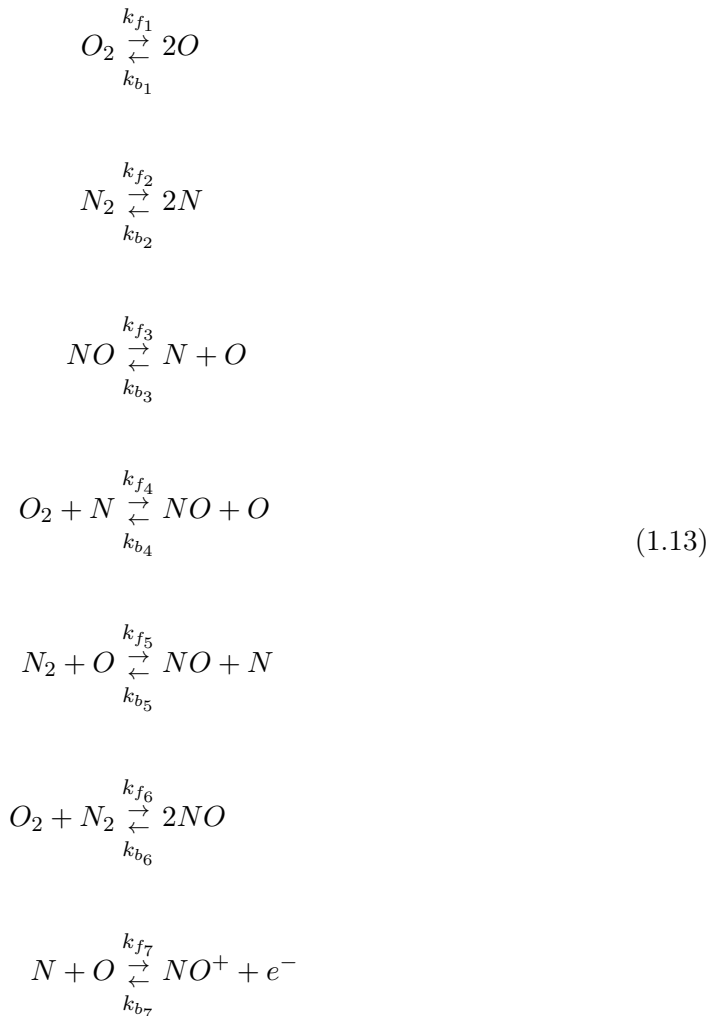
où

$$r_{air} = c_{O_2} r_{O_2} + c_{N_2} r_{N_2} \quad (1.12)$$

L'expression donnée reste valable tant que la composition de l'air ne varie pas. Néanmoins, lorsque sa température augmente des réactions chimiques ont lieu, changeant ainsi sa composition.

1.2.3 Comportement de l'air dans le cas général

A température ambiante, l'air est composé de deux principales molécules : O_2 et N_2 . A haute température, il est le siège de nombreuses réactions chimiques. Dans ce manuscrit, nous présentons les sept principales réactions ([2]). Des modèles plus complexes permettent de prendre en compte l'ensemble des réactions (nous renvoyons par exemple au modèle de Dunn/Kang [19] qui est un modèle à 31 réactions).



Les deux premières réactions sont des réactions de dissociation. La dernière est une réaction d'ionisation. L'air se retrouve donc composé de sept espèces : $(O_2, N_2, O, N, NO, NO^+, e^-)$. Pour connaître la concentration de chaque espèce, il faut calculer l'évolution des réactions. Cela est rendu possible grâce aux constantes de vitesse k_{f_i} et k_{b_i} associées à chacune des réactions. Prenons l'exemple de l'évolution de la concentration de dioxygène :

$$\begin{aligned} \left. \frac{d[O_2]}{dt} \right|_{chim} &= -k_{f_1} [O_2] + k_{b_1} [O]^2 \\ &\quad - k_{f_4} [O_2][N] + k_{b_4} [NO][O] \\ &\quad - k_{f_6} [O_2][N_2] + k_{b_6} [NO]^2 \end{aligned} \quad (1.14)$$

Les constantes de vitesse dépendent de la température. Leurs expressions sont de la forme :

$$k_f = C_f T^{\eta_f} e^{-K_f/RT} \quad (1.15)$$

où les constantes C_f, η_f et K_f sont tabulées en fonction de la température.

Afin d'illustrer ce phénomène, nous représentons ci-dessous (cf. Fig.1.6) l'évolution des différentes espèces de l'air à l'équilibre en fonction de la température. La pression est fixée à 1 bar.

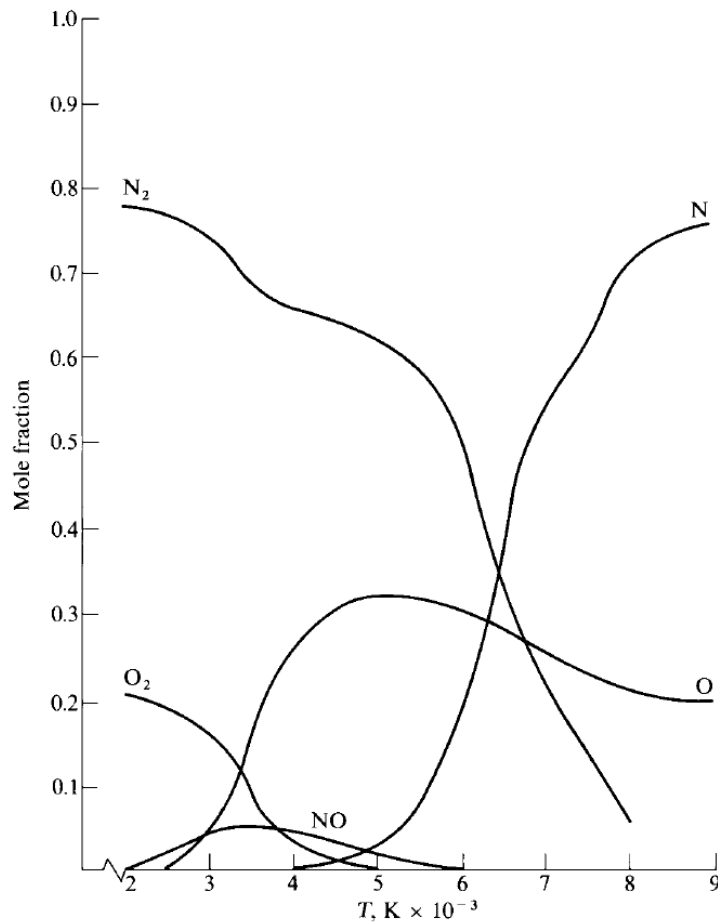


FIGURE 1.6 – Évolution de la composition de l'air en fonction de la température pour une pression de 1 bar [2]

1.3 Équations générales des écoulements hypersoniques

Après ces rappels sur les principaux phénomènes physiques rencontrés dans le cas d'un écoulement hypersonique, nous présentons, dans cette partie, les équations qui permettent de les modéliser.

1.3.1 Différents régimes d'écoulement

Un fluide est composé d'un certain nombre de molécules. Lorsqu'il y en a peu (en un sens qui sera précisé plus loin), le comportement du fluide s'obtient en modélisant la densité de particules dans l'espace des phases (position, vitesse, degrés de liberté interne des molécules), grâce à l'équation de Boltzmann (équation qui sera abordée dans le chapitre 2 pour la phase particulaire). A l'inverse, quand le nombre de molécules devient très important, il devient plus judicieux d'utiliser des modèles continus tels que ceux de Navier-Stokes ou d'Euler. La caractérisation du régime d'écoulement est donnée par le nombre de Knudsen, défini comme le rapport entre une longueur de référence de l'écoulement L et le libre parcours moyen du fluide l^* . Ce nombre est donc lié à la fois à la géométrie et au fluide étudié.

$$K_n = \frac{l^*}{L} \quad (1.16)$$

En fonction de celui-ci, le régime est qualifié de raréfié ou de continu (cf. Fig. 1.7).

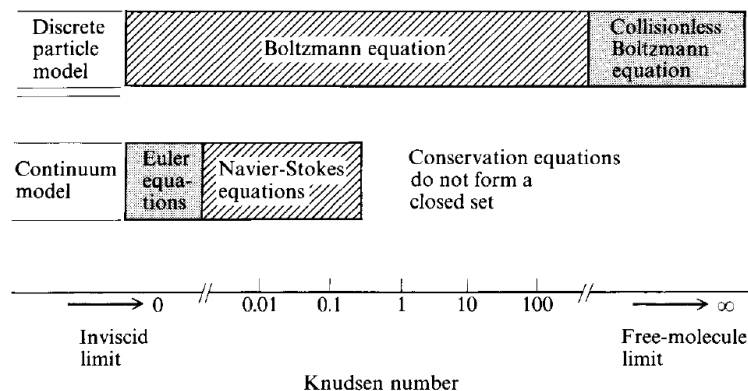


FIGURE 1.7 – Caractérisation du régime d'écoulement en fonction du nombre de Knudsen [2]

Dans le manuscrit, nous ferons l'hypothèse (toujours vérifiée dans les applications visées) que l'écoulement est continu en régime compressible. Nous utiliserons donc les équations de Navier-Stokes ou Euler.

Remarque : les équations de Navier-Stokes sont une approximation, à l'ordre 2 par rapport au paramètre K_n , de l'équation de Boltzmann dans le cas où le nombre de Knudsen est petit ([9]). Les deux approches sont donc compatibles.

1.3.2 Équations de Navier-Stokes sans réaction chimique

Les équations d'Euler, découvertes à la fin du XVIIème siècle, décrivent le comportement d'un fluide parfait, c'est-à-dire sans viscosité. Ces équations s'obtiennent à partir des lois de conservation (de masse, de quantité de mouvement et de l'énergie) sur un volume de fluide. Quelques années plus tard (1823), Navier a introduit le concept de viscosité dans ces équations. Enfin, en 1845, Stokes a formalisé le concept de viscosité, donnant ainsi naissance aux équations de Navier-Stokes. Celles-ci permettent de simuler le comportement d'un fluide visqueux. Pour simplifier la compréhension, nous commencerons par la description des équations de Navier-Stokes sans termes de réaction chimique, pour ensuite envisager le cas général.

Considérons un fluide contenu dans un ouvert Ω de \mathbb{R}^3 . Notons X un point de Ω . $\rho(t, X)$ ($kg.m^{-3}$), \mathbf{u} ($m.s^{-1}$), $p(t, X)$ (Pa), $e(t, X)$ ($J.kg^{-1}$) désigneront respectivement la densité, le vecteur vitesse, la pression et l'énergie interne par unité de masse du fluide.

Équation de conservation de la masse :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (1.17)$$

Équation de conservation de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \Sigma + \rho \mathbf{g} \quad (1.18)$$

Σ représente le tenseur des contraintes visqueuses (Pa) et \mathbf{g} désigne les forces massiques qui s'exercent sur le fluide ($m.s^{-2}$).

Équation de conservation de l'énergie :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{u}) = \nabla \cdot ((\Sigma - pI) \cdot \mathbf{u}) + \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{u} - \nabla \cdot \mathbf{q}_C - \nabla \cdot \mathbf{q}_R \quad (1.19)$$

$E = e + \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}{2}$ représente l'énergie totale par unité de masse.

\mathbf{q}_C et \mathbf{q}_R ($kg.s^{-3}$) désignent respectivement les flux de chaleur ($kg.s^{-3}$) dus à la conduction et au rayonnement.

Soit $\sigma = -p\mathbf{I} + \boldsymbol{\Sigma}$ le tenseur des contraintes. Nous faisons de plus les hypothèses usuelles que les forces massiques ainsi que les transferts radiatifs sont négligeables dans notre application. Notons \mathbf{q} le flux de chaleur conductif. Les équations s'écrivent alors sous la forme :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = \nabla \cdot \sigma \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\sigma \cdot \mathbf{u}) - \nabla \cdot \mathbf{q} \end{cases} \quad (1.20)$$

Le modèle écrit précédemment est un système ouvert comportant plus d'inconnues que d'équations. Pour le fermer, il faut relier les inconnues intermédiaires σ , \mathbf{q} et p aux inconnues principales ρ , \mathbf{u} et E . Nous présentons directement certains modèles, nous renvoyons à [22] et [60] pour plus de détails.

1.3.2.1 Lois de comportement

Pour les fluides newtoniens (comme de l'air), le tenseur des contraintes visqueuses $\boldsymbol{\Sigma}$ s'exprime à l'aide du vecteur vitesse \mathbf{u} et de la viscosité dynamique μ (*Pa.s*) :

$$\boldsymbol{\Sigma} = \mu \left(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right) \quad (1.21)$$

1.3.2.2 Loi d'évolution de μ en fonction de T

Il existe plusieurs expressions pour calculer la viscosité d'un fluide. Dans le cas de l'air, la relation la plus utilisée est la relation de Sutherland [79] :

$$\mu = \mu_{ref} \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^{1.5} \left(\frac{T_{ref} + T_0}{T + T_0} \right) \quad (1.22)$$

avec $T_{ref} = 273.15 K$, $T_0 = 110.4 K$ et $\mu_{ref} = 1.711 \cdot 10^5 Pa.s$.

Cette équation est valable pour des températures inférieures à 1500 K. Dans le cas de températures plus importantes et lorsque le fluide considéré est l'air, la loi PANT (PASSive Nosetip Technology [93]) permet de calculer la viscosité :

$$\mu(T) = 3.334 \cdot 10^{-7} T^{0.7} \quad (1.23)$$

Nous insistons sur le fait que cette corrélation n'est valable que pour l'air.

Pour le flux de chaleur, la loi de Fourier permet d'écrire :

$$\mathbf{q} = -\lambda(T) \nabla T \quad (1.24)$$

avec λ la conductivité thermique du fluide ($W.m^{-1}.K^{-1}$). Celle-ci est calculée grâce au nombre de Prandtl Pr , qui représente le rapport entre la diffusivité de quantité de mouvement et la diffusivité thermique :

$$Pr = \frac{\mu(T) c_p(T)}{\lambda(T)} \quad (1.25)$$

D'où

$$\lambda(T) = \frac{\mu(T)}{Pr} c_p(T) \quad (1.26)$$

En général Pr est supposé constant. Par contre, c_p , la capacité thermique massique à pression constante, est une fonction de la température T . En effet, lorsque la température devient importante, l'activation de la vibration (voir la partie précédente) entraîne une variation de c_p avec la température.

1.3.2.3 Loi d'état

Nous avons relié les variables Σ et \mathbf{q} à la température T et au coefficient c_p . Il reste maintenant à faire le lien entre la température T , le coefficient c_p , la pression et les variables ρ , \mathbf{u} et E (ou e de manière équivalente). Cela se fait *via* le choix d'une équation d'état. L'équation d'état est la fonction qui relie les variables thermodynamiques p , ρ , T , e et les concentrations massiques.

Nous présentons ici le modèle 'gaz parfait à gamma variable'. Ce modèle n'est valable qu'à des températures suffisamment basses pour que les réactions de dissociation soient inactives. L'expression de la pression est alors la suivante :

$$p = \rho r_{air} T \quad (1.27)$$

Comme nous l'avons vu précédemment, l'énergie interne massique e s'écrit alors :

$$e = \frac{5}{2} r_{air} T + \frac{c_{O2} r_{O2} T_{vib}^{O2}}{\exp(T_{vib}^{O2}/T) - 1} + \frac{c_{N2} r_{N2} T_{vib}^{N2}}{\exp(T_{vib}^{N2}/T) - 1} \quad (1.28)$$

L'expression du coefficient c_p s'obtient en plusieurs étapes. Introduisons la capacité thermique à volume constant c_v :

$$c_v = \left(\frac{\partial e}{\partial T} \right)_v \quad (1.29)$$

Pour un gaz parfait, ces deux constantes sont reliées par la relation :

$$c_p = c_v + r \quad (1.30)$$

L'expression de c_v (et donc de c_p) se calcule grâce à l'expression (1.28) :

$$\begin{aligned} c_v &= \left(\frac{\partial e}{\partial T} \right)_v \\ &= \frac{5}{2} r_{air} + \frac{c_{O_2} r_{O_2} \exp(T_{vib}^{O_2}/T) (T_{vib}^{O_2}/T)^2}{(\exp(T_{vib}^{O_2}/T) - 1)^2} + \frac{c_{N_2} r_{N_2} \exp(T_{vib}^{N_2}/T) (T_{vib}^{N_2}/T)^2}{(\exp(T_{vib}^{N_2}/T) - 1)^2} \end{aligned} \quad (1.31)$$

Par définition, nous avons également :

$$\gamma = \frac{c_p}{c_v} \quad (1.32)$$

c_p et c_v sont des fonctions de la température, γ l'est également, d'où la terminologie "gaz parfait à γ variable".

1.3.3 Équation de Navier-Stokes pour les mélanges de gaz réactifs

Dans cette partie, afin de simplifier les notations, nous omettrons l'indice f qui désigne le fluide. Considérons un écoulement de N_e espèces chimiques qui réagissent entre elles via N_r réactions chimiques. Les équations de Navier-Stokes sont modifiées par rapport aux précédentes :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} \rho_i + \nabla \cdot (\rho_i \mathbf{u} + J_i) = \dot{\omega}_i & \forall i = 1, \dots, N_e \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = \nabla \cdot \sigma \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\sigma \cdot \mathbf{u}) + \nabla \cdot \mathbf{q} \end{cases} \quad (1.33)$$

où $\dot{\omega}_i$ et J_i représentent respectivement le taux de production massique et le flux de diffusion de l'espèce i .

1.3.3.1 Liens entre les grandeurs par espèce et les grandeurs du mélange

Chaque espèce i est caractérisée par sa densité ρ_i , son énergie interne e_i , sa pression partielle p_i , son taux de production massique ω_i et son flux de diffusion dans l'écoulement J_i .

Nous considérons que les espèces sont à l'équilibre thermique local et qu'elles ont donc toutes la même température T , appelée température du mélange.

Le lien entre les grandeurs 'locales' (de chaque espèce) et globales (du mélange) se fait via les relations suivantes :

$$\rho = \sum_{i=1}^{N_e} \rho_i \quad p = \sum_{i=1}^{N_e} p_i \quad e = \sum_{i=1}^{N_e} c_i e_i \quad c_i = \frac{\rho_i}{\rho} \quad (1.34)$$

Le tenseur des contraintes garde son expression classique :

$$\boldsymbol{\Sigma} = \mu \left(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right) \quad (1.35)$$

Le flux de chaleur est modifié et prend en compte les flux de diffusion massique J_i

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T + \sum_{i=1}^{N_e} h_i J_i \quad (1.36)$$

avec h_i l'enthalpie massique de l'espèce i :

$$h_i = e_i + \frac{p_i}{\rho_i} \quad (1.37)$$

Il reste à fermer le système via des modèles pour les termes μ , λ , ω_i et J_i .

1.3.3.2 Calcul de la viscosité du mélange

La viscosité du mélange se calcule grâce au modèle de Wilke [81] :

$$\mu = \sum_{i=1}^{N_e} \frac{\frac{c_i}{M_i} \mu_i}{\sum_{j=1}^{N_e} X_j \phi_{ij}} \quad (1.38)$$

avec M_i la masse molaire de l'espèce i .

ϕ_{ij} est défini par :

$$\phi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{M_i}{M_j}\right)^{-1/2} \left(1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j}\right)^{1/2} \left(\frac{M_i}{M_j}\right)^{1/4}\right)^{1/2} \quad (1.39)$$

1.3.3.3 Calcul de la conductivité thermique du mélange

La conductivité du mélange se calcule de manière analogue à la viscosité :

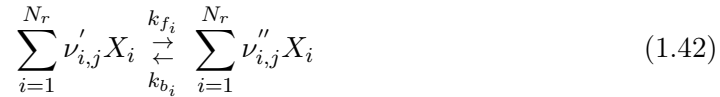
$$\lambda = \sum_{i=1}^{N_e} \frac{c_i \lambda_i}{\sum_{j=1}^{N_e} X_j \phi_{ij}} \quad (1.40)$$

avec

$$\phi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{M_i}{M_j}\right)^{-1/2} \left(1 + \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_j}\right)^{1/2} \left(\frac{M_i}{M_j}\right)^{1/4}\right)^{1/2} \quad (1.41)$$

1.3.3.4 Calcul des termes de production massique des espèces

L'équation de production / destruction des N_e espèces peut s'écrire sous la forme de N_r réactions chimiques :



avec $\nu'_{i,j}$ et $\nu''_{i,j}$ les coefficients stœchiométriques associés aux réactions. En généralisant l'équation (1.13), le taux de production de l'espèce i s'écrit finalement sous la forme :

$$\dot{\omega}_i = M_i \sum_{j=1}^{N_r} (\nu''_{i,j} - \nu'_{i,j}) \left(k_{f_j} \prod_{k=1}^{N_e} \left(\frac{\rho C_k}{M_k}\right)^{\nu'_{k,j}} - k_{b_j} \prod_{k=1}^{N_e} \left(\frac{\rho C_k}{M_k}\right)^{\nu''_{k,j}} \right) \quad (1.43)$$

Les coefficients k_{f_i} et k_{b_i} sont des fonctions de la température, comme nous l'avons vu précédemment (cf. (1.15)).

1.3.3.5 Calcul des termes de diffusion massique

Pour le calcul des termes de diffusion J_i , il existe plusieurs niveaux de modélisation. Nous présentons ici le modèle le plus simple, appelé loi de Fick, et renvoyons à [15] pour de plus amples détails.

Dans ce modèle, le terme de diffusion vaut :

$$J_i = -\frac{\lambda Le_i}{c_p} \nabla c_i \quad (1.44)$$

avec Le_i le nombre de Lewis, qui représente le rapport entre la diffusivité de l'espèce i et la diffusivité thermique. En fonction des applications rencontrées, il existe des formules permettant de calculer le nombre de Lewis et ainsi d'en déduire le terme J_i .

Après avoir présenté de manière complète les équations de Navier-Stokes pour des écoulements réactifs, nous décrivons ici quelques modèles plus simples couramment utilisés.

1.3.4 Modèles simplifiés

1.3.4.1 Modèle "gaz parfait à γ constant"

Ce modèle de gaz parfait est le plus basique. Il permet de décrire le comportement de l'air tant que les degrés de liberté de vibration ne sont pas activés. Les expressions de la pression et de l'énergie interne massique sont simplifiées :

$$p = \rho r_{air} T \quad (1.45)$$

$$e = c_v T \quad c_v = \frac{5}{2} r_{air} \quad (1.46)$$

1.3.4.2 Modèle "gaz parfait à γ variable et chimie figée"

Dans ce modèle, les temps caractéristiques des réactions chimiques sont supposés très grands devant le temps caractéristique d'étude. Les réactions chimiques sont donc négligées mais les capacités thermiques de O_2 et de N_2 ne sont plus supposées constantes et prennent en compte l'énergie de vibration :

$$c_v = \frac{5}{2} r_{air} + \frac{c_{O_2} r_{O_2} \exp(T_{vib}^{O_2}/T) (T_{vib}^{O_2}/T)^2}{(\exp(T_{vib}^{O_2}/T) - 1)^2} + \frac{c_{N_2} r_{N_2} \exp(T_{vib}^{N_2}/T) (T_{vib}^{N_2}/T)^2}{(\exp(T_{vib}^{N_2}/T) - 1)^2} \quad (1.47)$$

Cette hypothèse est caractéristique des écoulements à très grande vitesse et faible densité.

1.3.4.3 Modèle "gaz parfait à γ variable et chimie infiniment rapide" dit "à l'équilibre"

Contrairement au précédent, ce modèle suppose que les temps caractéristiques des réactions chimiques et d'équilibre vibrationnel sont très petits devant le temps caractéristique d'étude. Les réactions chimiques, ainsi que la vibration, se trouvent donc instantanément à l'équilibre. Cette assertion est vérifiée dans le cas d'écoulements à faible vitesse et forte densité, comme il peut se produire au niveau de la ligne d'arrêt.

1.4 Analyse des phénomènes physiques prépondérants dans le cas de l'interaction entre un écoulement d'air hypersonique et un obstacle

Dans les parties précédentes, nous avons décrit le comportement de l'air à haute température. Une présentation des principaux modèles permettant de le modéliser a été faite. Dans la partie suivante, nous allons examiner les phénomènes principaux présents dans le cas d'un écoulement autour d'un obstacle. Les différents modèles évoqués précédemment seront comparés.

1.4.1 Configuration géométrique étudiée

Dans la suite du manuscrit, nous nous intéresserons à un écoulement hypersonique autour d'un quart de sphère de rayon $R = 1m$ (cf. Fig. 1.8).

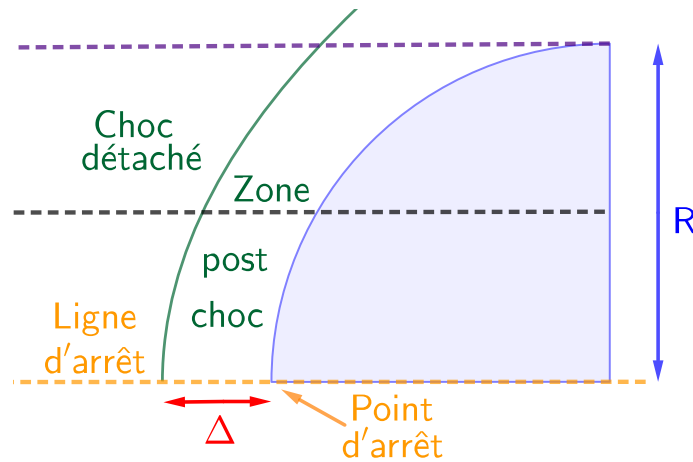


FIGURE 1.8 – Schéma de la configuration géométrique étudiée

Dans un premier temps, nous présentons des résultats de simulation afin de :

- comparer les différents modèles,
- donner un ordre de grandeur des valeurs rencontrées dans la zone post-choc.

Nous indiquons dans les tableaux suivants les conditions infinies du calcul. Seul le nombre de Mach amont M_∞ est variable, les autres grandeurs (densité ρ_∞ , pression P_∞ , température T_∞) sont fixées.

Grandeurs	Valeur minimale	Valeur maximale
Nombre de Mach M_∞	2	25

TABLE 1.3 – Nombre de Mach amont

Grandeurs	Valeurs de référence
Température T_∞	293 K
Pression P_∞	13332 Pa
Densité ρ_∞	0.16 kg.m ⁻³

TABLE 1.4 – Valeurs de référence utilisées pour les simulations

1.4.2 Influence du choix du modèle sur la température

Afin d'illustrer l'importance du choix du modèle, nous comparons les températures de l'écoulement en zone post-choc en réalisant plusieurs coupes à différentes hauteurs :

- $y = 0$ (en orange sur la figure 1.8),
- $y = R/2$ (en noir sur la figure 1.8),
- $y = R$ (en violet sur la figure 1.8).

Nous traçons ensuite la température en fonction de la position x et ce pour les trois modèles simplifiés décrits précédemment ("gaz parfait à γ constant", aussi appelé "Perfect Gas", "gaz parfait à γ variable et chimie figée", aussi appelé "Frozen Gas", "gaz parfait à γ variable et chimie infiniment rapide", aussi appelé "Equilibrium Gas") et le modèle global comprenant la cinétique chimique, aussi appelé "Chemical Gas". Pour chaque nombre de Mach infini M_∞ , nous réaliserons les quatre figures suivantes :

- l'écoulement entier (à gauche),
- la coupe au niveau de la ligne d'arrêt $y = 0$ (en bas à droite),
- la coupe à $y = R/2$ (au milieu à droite),
- la coupe à $y = R$ (en haut à droite).

Comme attendu, les différences entre les modèles sont d'autant plus grandes que la température est importante. Tant que la température reste faible, les quatre modèles sont valables : c'est le cas de l'écoulement à Mach 2 dans lequel la température n'excède pas les 550 K. Dès que la température augmente, les modèles de "gaz parfait à γ constant" et de "gaz parfait à γ variable et chimie figée" deviennent faux. A l'inverse, le modèle à l'équilibre est une bonne approximation puisque les résultats sont très proches de celui avec chimie réactive. La coupe, réalisée au niveau de la ligne d'arrêt pour l'écoulement à Mach 25, nous permet de nous rendre compte de l'importance du choix du modèle : avec le modèle de "gaz parfait à γ constant", l'écoulement atteint une température proche de 40000 K alors que le calcul en chimie réactive (plus fidèle à la réalité) fournit un résultat de 10000K, soit une température quatre fois moins grande.

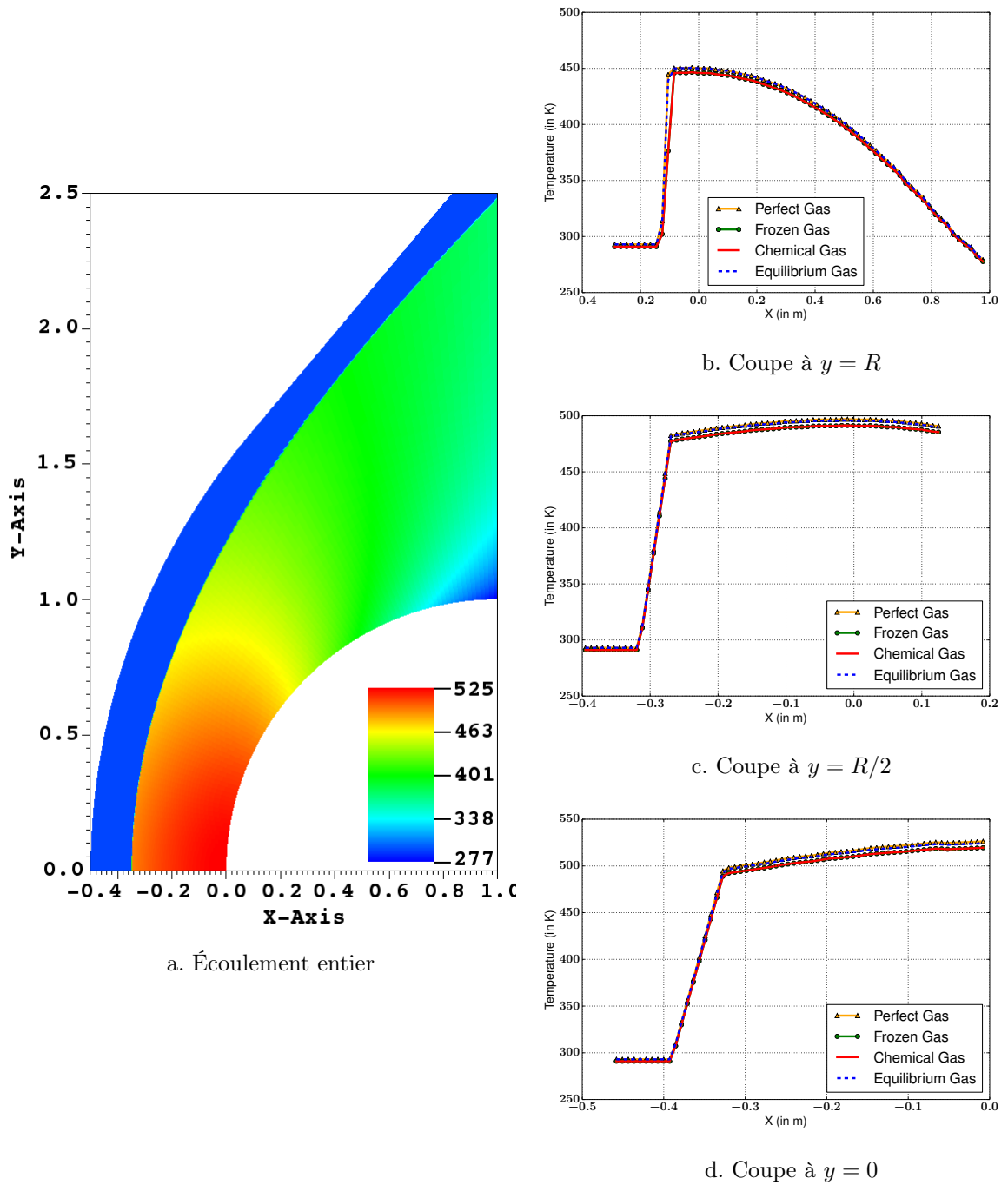
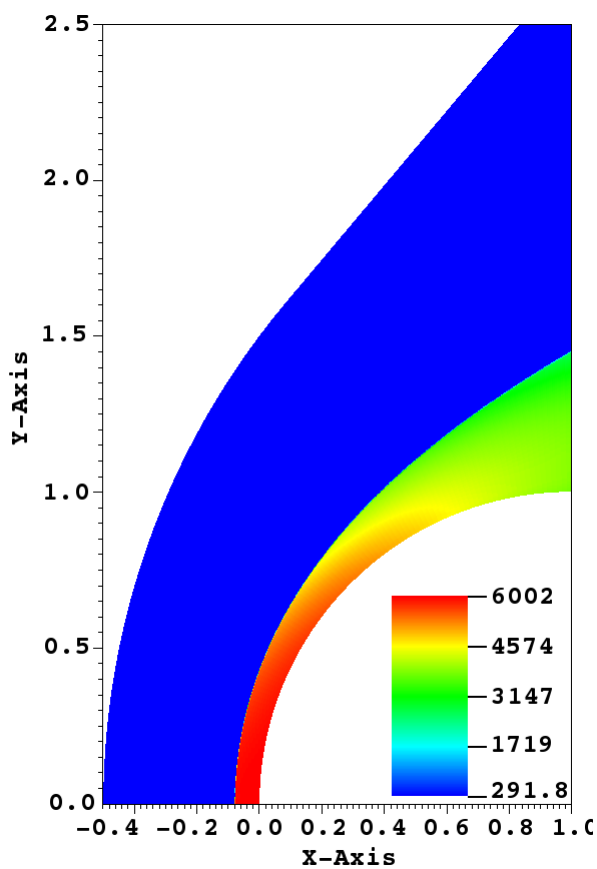
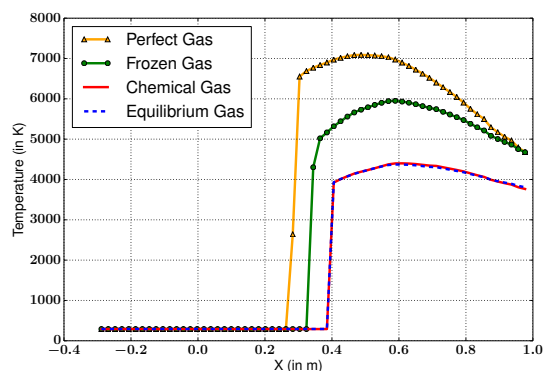


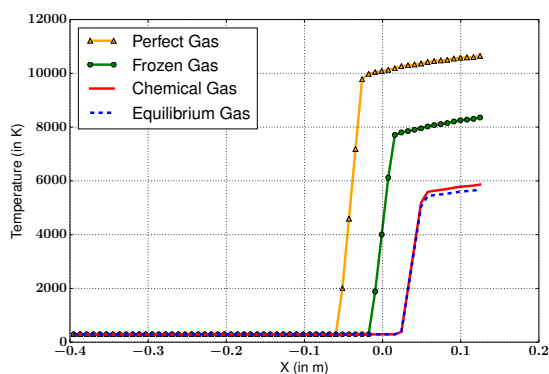
FIGURE 1.9 – Évolution de la température pour $M_\infty = 2$



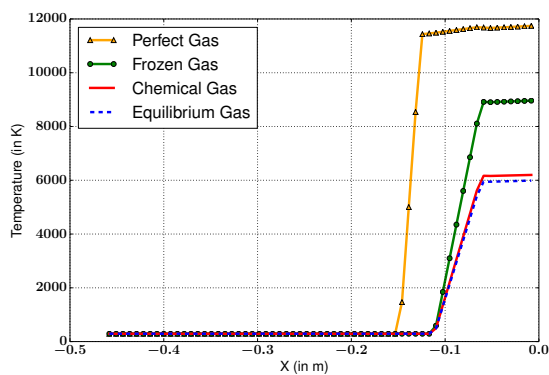
a. Écoulement entier



b. Coupe à $y = R$



c. Coupe à $y = R/2$



d. Coupe à $y = 0$

FIGURE 1.10 – Évolution de la température pour $M_\infty = 14$

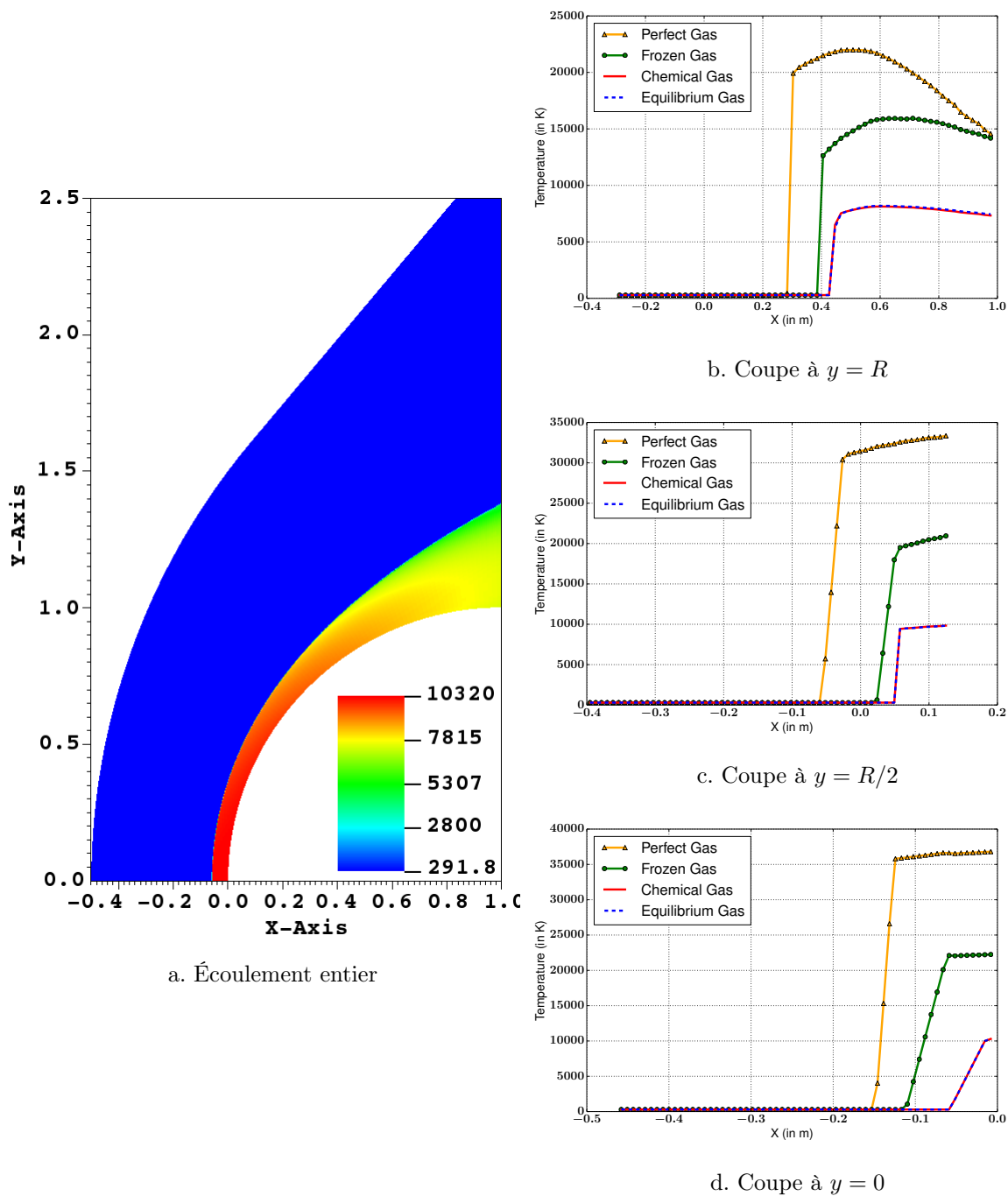


FIGURE 1.11 – Évolution de la température pour $M_\infty = 25$

L'étude de la température de l'écoulement, bien que très pertinente pour comparer les modèles, n'est pas très rapide. En effet, comme nous l'avons vu, il faut effectuer pour chaque configuration plusieurs coupes à différentes hauteurs. Afin de s'affranchir de ce problème, nous allons, dans la partie suivante, caractériser l'ensemble de l'écoulement par un unique paramètre : la distance de choc au niveau de la ligne d'arrêt, notée Δ sur la figure 1.8. La connaissance de celle-ci permet, *via* des corrélations (comme celle de Billig [5]), de calculer la forme complète du choc détaché. De plus dans le cas d'un écoulement contenant des particules, la distance de choc détermine le temps de séjour des particules dans la zone post-choc (ce que nous aborderons dans le chapitre suivant).

1.4.3 Influence du choix du modèle sur la distance de choc

Les conditions initiales du fluide sont résumées dans les tableaux 1.3 et 1.4. Nous traçons ci-dessous (cf. Fig. 1.12) l'évolution de la distance de choc en fonction du nombre de Mach pour les quatre modèles. A l'instar de ce qui est fait dans la littérature, les distances de choc sont adimensionnées par le diamètre de la sphère.

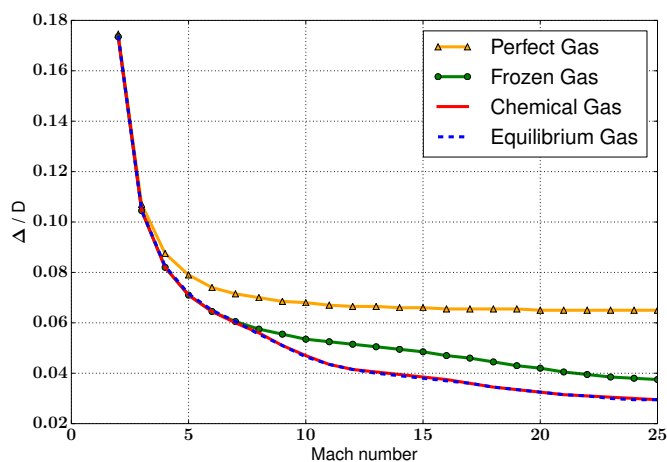


FIGURE 1.12 – Évolution de la distance de choc pour différents Mach amont

Comme précédemment, les modèles de "gaz parfait à γ constant" et de "gaz parfait à γ variable et chimie figée" restent valables tant que la température est faible. Dans notre cas, ce n'est pas directement la température mais le nombre de Mach infini qui joue (les deux grandeurs étant reliées comme nous le verrons plus tard) :

- pour des nombres de Mach inférieurs à 4, le modèle de "gaz parfait à γ constant" est valable,
- pour des nombres de Mach inférieurs à 8, le modèle de "gaz parfait à γ variable et chimie figée" est valable.

Le modèle "à l'équilibre" et le modèle "chimie réactive" sont encore confondus. Cela est dû au fait que la densité de l'écoulement est grande et sa vitesse est faible (ce qui correspond aux hypothèses du modèle à l'équilibre).

Nous traçons ci-dessous l'évolution de la distance de choc Δ en fonction du Mach pour un écoulement cent fois moins dense, tout en maintenant la même température.

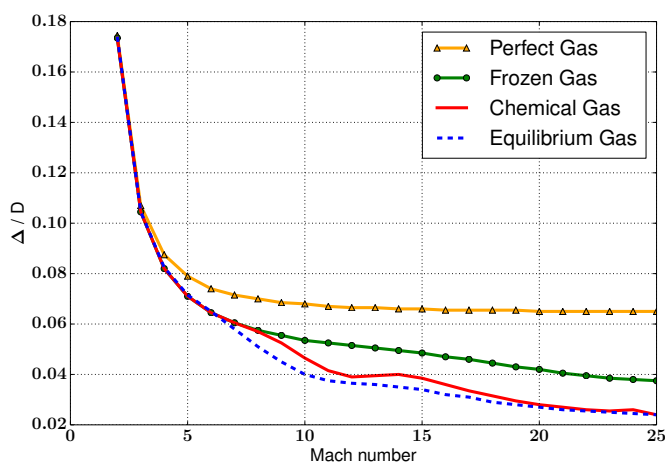


FIGURE 1.13 – Évolution de la distance de choc pour différents Mach amont

Il apparaît cette fois-ci (cf. Fig. 1.13) un écart entre le modèle "à l'équilibre" et le modèle "chimie réactive". Le comportement réel du gaz ("chimie réactive") est d'abord proche du modèle "gaz parfait à γ variable et chimie figée" et décroche vers le comportement du modèle "à l'équilibre". Le modèle "à l'équilibre" reste donc une approximation de la réalité. Néanmoins, dans la plupart des applications, la densité étant importante, il est valable. Par ailleurs, comme il ne résout pas les équations cinétiques chimiques, il est beaucoup plus rapide que le modèle de "chimie réactive".

1.4.4 Amélioration de la formule de Billig pour le calcul de la distance de choc

1.4.4.1 Introduction

Lors de l'étude des distances de choc, nous nous sommes aperçus que la formule de Billig, très utilisée dans la littérature, n'est plus valable lorsque le nombre de Mach devient grand. Nous traçons ci-dessous (cf. Fig. 1.14) l'évolution de la distance de choc en fonction du nombre de Mach amont. Les conditions amont du fluide sont celles du

tableau 1.4. Nous rappelons l'expression de la formule de Billig :

$$\frac{\Delta}{D} = 0.0715 \exp\left(\frac{3.24}{M_\infty^2}\right) \quad (1.48)$$

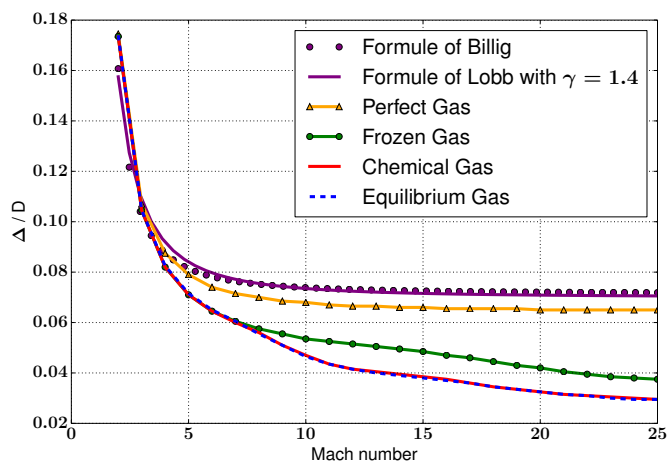


FIGURE 1.14 – Évolution de la distance de choc en fonction du Mach amont : comparaison entre la formule de Billig, la formule de Lobb et les résultats numériques

Cette formule est correcte pour des nombres de Mach faibles mais possède des limitations quant à son domaine d'application. De plus, à partir de Mach 9, la distance de choc ne varie plus, ce qui n'est pas le cas dans la réalité. Le comportement de la corrélation de Billig est semblable à celui du modèle de "gaz parfait à γ constant".

Cette formule est couramment utilisée car elle permet de déterminer immédiatement, sans outils de calcul sophistiqués, une distance de choc en fonction du nombre de Mach. Partant de ce constat, nous avons développé une formule qui reste facilement calculable mais qui élargit le domaine d'application ; c'est l'objet de cette partie.

1.4.4.2 Constats initiaux

Nous sommes partis du constat suivant : la corrélation de Billig donne des résultats proches de celle de Lobb dans le cas d'un gaz parfait avec $\gamma = 1.4$. La formule de Lobb [54] permet de calculer la distance de choc autour d'une sphère en fonction du rapport de la densité infinie amont (notée ρ_∞) et post-choc (notée ρ_{pc}) :

$$\frac{\Delta}{D} = 0.41 \frac{\rho_\infty}{\rho_{pc}} \quad (1.49)$$

Le long de la ligne d'arrêt, le choc peut être considéré comme droit, ce qui permet d'appliquer les relations de Rankine-Hugoniot :

$$\frac{\rho_\infty}{\rho_{pc}} = \frac{(\gamma - 1) M_\infty^2 + 2}{(\gamma + 1) M_\infty^2} \quad (1.50)$$

Sous l'hypothèse gaz parfait avec $\gamma = 1.4$, la formule de Lobb devient donc :

$$\frac{\Delta}{D} = 0.41 \frac{0.4 M_\infty^2 + 2}{2.4 M_\infty^2} \quad (1.51)$$

Les corrélations de Billig et de Lobb ne dépendent plus que du nombre de Mach M_∞ . Sur la figure 1.14, les deux corrélations sont tracées, de même que les résultats numériques. Ces corrélations donnent des résultats similaires. Cela nous permet d'affirmer que la formule de Billig n'est valable que pour de l'air, sous l'hypothèse gaz parfait. Billig lui-même avait anticipé ce point lors de sa publication : "Since the correlations were based on tests made at relatively low temperature, it would be expected that results would agree with the theories for a perfect gas with $\gamma = 1.4$ ".

1.4.4.3 Idée directrice

Comme nous l'avons vu, l'hypothèse d'un gamma constant n'est valable que pour des températures post-choc T_{pc} faibles (inférieures à 600 K). L'idée directrice est de combiner les trois relations suivantes :

$$\begin{aligned} \frac{\Delta}{D} &= 0.41 \frac{\rho_\infty}{\rho_{pc}} && \text{Formule de Lobb} \\ \frac{\rho_\infty}{\rho_{pc}} &= \frac{(\gamma - 1) M_\infty^2 + 2}{(\gamma + 1) M_\infty^2} && \text{Relation de Rankine-Hugoniot} \\ \gamma &= f(T_{pc}) \end{aligned} \quad (1.52)$$

NB : les relations de Rankine-Hugoniot ne sont plus valables lorsque γ varie. Néanmoins, nous ferons cette approximation pour construire une formule analytique. La validité de celle-ci sera testée *in fine* par comparaison avec les simulations numériques.

1.4.4.4 Construction de la formule

L'évolution de γ dans le cas le plus général (comprenant réactions chimiques, énergies électroniques, ...) ne permettrait pas d'obtenir une formule analytique. L'hypothèse d'un "gaz parfait à γ variable et chimie figée" sera faite. Les énergies électriques seront, de

plus, négligées. L'expression de γ est alors la suivante :

$$\gamma = \frac{c_p}{c_v} = \frac{c_v + r_{air}}{c_v} = 1 + \frac{r_{air}}{c_v} \quad (1.53)$$

avec

$$c_v = \frac{5}{2} r_{air} + \frac{c_{O2} r_{O2} \exp(T_{vib}^{O2}/T_{pc}) (T_{vib}^{O2}/T_{pc})^2}{(\exp(T_{vib}^{O2}/T_{pc}) - 1)^2} + \frac{c_{N2} r_{N2} \exp(T_{vib}^{N2}/T_{pc}) (T_{vib}^{N2}/T_{pc})^2}{(\exp(T_{vib}^{N2}/T_{pc}) - 1)^2} \quad (1.54)$$

Nous traçons ci-dessous (cf. Fig.1.15) l'évolution du coefficient γ en fonction de la température. Lorsque celle-ci est faible (inférieure à $600K$), le coefficient est constant à sa valeur usuelle $\gamma = 1.4$. A partir de $600K$, la vibration s'active (confère la partie 1.2.1.1 page 6) et le coefficient diminue. Pour des températures de l'ordre de $4000K$, le coefficient redevient constant à la valeur de 1.29.

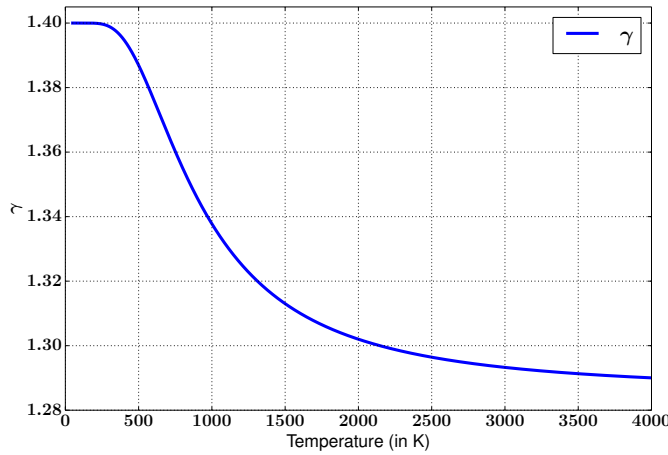


FIGURE 1.15 – Évolution du coefficient γ en fonction de la température

Pour calculer la température post-choc, nous résolvons, *via* une méthode de point fixe, l'équation de Rankine-Hugoniot sur la température et l'équation d'évolution de γ :

$$\begin{cases} T_{pc} = T_{\infty} \frac{2\gamma(T_{pc})(\gamma(T_{pc}) - 1)}{(\gamma(T_{pc}) + 1)^2} M_{\infty}^2 \\ \gamma(T_{pc}) = f(T_{pc}) \end{cases} \quad (1.55)$$

f étant la fonction issue de la combinaison des équations (1.53) et (1.54).

La formule obtenue est de la forme :

$$\frac{\Delta}{D} = g(M_{\infty}, T_{\infty}) \quad (1.56)$$

Contrairement à la formule de Billig, celle-ci dépend de deux paramètres : le Mach infini M_∞ et la température infinie T_∞ . Pour l'instant, l'expression de g ne permet pas un calcul instantané. L'objectif des paragraphes suivants est d'approximer g de manière à obtenir une formule analytique.

1.4.4.5 Mise en évidence de deux états asymptotiques

Nous commençons par tracer l'évolution de la distance de choc en fonction de la température infinie. La figure 1.16 met en évidence deux comportements asymptotiques : pour les faibles nombres de Mach, le comportement est semblable à celui $\gamma = 1.4$, pour de forts nombres de Mach, le comportement est proche de celui $\gamma = 1.29$.

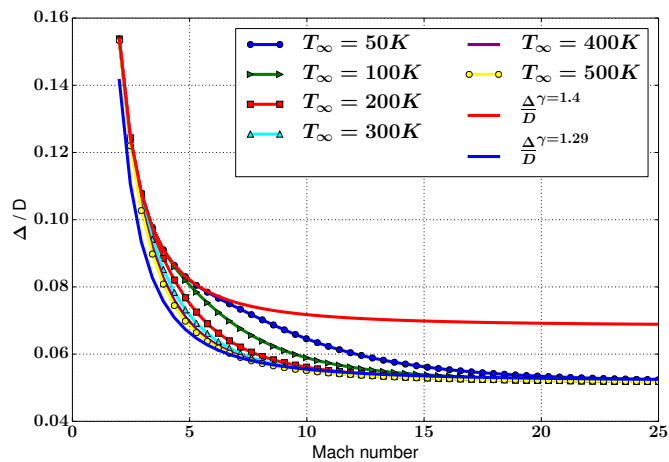


FIGURE 1.16 – Évolution de la distance de choc en fonction du nombre de Mach infini pour différentes températures infinies

Ces deux asymptotes étant uniquement fonction du nombre de Mach infini, il est possible de les approcher par les fonctions suivantes :

$$\frac{\Delta}{D}^{\gamma=1.4} = 0.07 + \frac{0.35}{M_\infty^2} \quad (1.57)$$

$$\frac{\Delta}{D}^{\gamma=1.29} = 0.05 + \frac{0.35}{M_\infty^2} \quad (1.58)$$

Le graphe 1.17 montre que ces formules sont de très bonnes approximations.

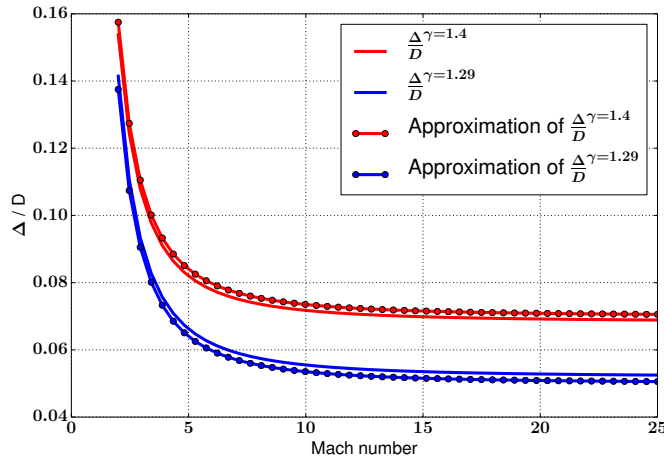


FIGURE 1.17 – Comparaison entre $\frac{\Delta}{D}^{\gamma=1.4}$, $\frac{\Delta}{D}^{\gamma=1.29}$ et leurs approximations

1.4.4.6 Détermination de la transition

Les deux états asymptotiques ayant été caractérisés, il reste à déterminer le passage de l'un à l'autre. Pour cela, nous avons fixé la température infinie T_∞ et avons fait varier le nombre de Mach infini M_∞ . Le passage d'une asymptote à l'autre est lié à la variation du coefficient γ (cf. Fig 1.15) et donc à la température post-choc T_{pc} . La formule est cherchée sous la forme suivante :

$$\frac{\Delta}{D} = \frac{\Delta}{D}^{\gamma=1.4} + \left(\frac{\Delta}{D}^{\gamma=1.29} - \frac{\Delta}{D}^{\gamma=1.4} \right) \left(\min \left(1, \frac{T_{pc}}{T_0} \right)^\alpha \right) \quad (1.59)$$

où $T_0 = 4000K$. NB : lorsque la température post-choc dépasse les $4000K$, la formule devient fautive car les autres effets (dissociation, ionisation, ...) deviennent importants. La fonction min permet de prolonger la formule au-delà de son domaine de validité. En effet, comme nous le verrons par la suite, la formule proposée donne de meilleurs résultats que la formule de Billig même hors de son domaine de validité.

La température post-choc T_{pc} peut-être reliée au nombre de Mach infini M_∞ et à la température infinie grâce à la formule (1.55) :

$$T_{pc} = T_\infty \frac{2\gamma(\gamma-1)}{(\gamma+1)^2} M_\infty^2 \quad (1.60)$$

Nous prenons $\gamma = 1.345$ qui correspond à la moyenne entre les valeurs extrêmes (1.4 et 1.29).

$$T_{pc} = T_\infty 0.169 M_\infty^2 \quad (1.61)$$

La formule proposée est la suivante :

$$\frac{\Delta}{D} = 0.07 + \frac{0.35}{M_\infty^2} - 0.02 \min \left(1, \left(\frac{T_\infty 0.169 M_\infty^2}{T_0} \right)^\alpha \right) \quad (1.62)$$

avec $T_0 = 4000K$. Le nombre α est trouvé numériquement : $\alpha = 0.5$.

Finalement, la formule est la suivante :

$$\frac{\Delta}{D} = 0.07 + \frac{0.35}{M_\infty^2} - 0.02 \min \left(1, \sqrt{\frac{T_\infty 0.169 M_\infty^2}{T_0}} \right) \quad (1.63)$$

NB : le comportement asymptotique est bien conforme à celui attendu :

$$\begin{aligned} \lim_{M_\infty \rightarrow 0} \min \left(1, \sqrt{\frac{T_\infty 0.169 M_\infty^2}{T_0}} \right) &= 0 \Rightarrow \lim_{M_\infty \rightarrow 0} \frac{\Delta}{D} = \frac{\Delta}{D}^{\gamma=1.4} \\ \lim_{M_\infty \rightarrow \infty} \min \left(1, \sqrt{\frac{T_\infty 0.169 M_\infty^2}{T_0}} \right) &= 1 \Rightarrow \lim_{M_\infty \rightarrow \infty} \frac{\Delta}{D} = \frac{\Delta}{D}^{\gamma=1.29} \end{aligned} \quad (1.64)$$

1.4.4.7 Validation

La formule (1.63) respecte bien le critère de simplicité. Il convient de vérifier sa validité et en particulier, de la comparer à la formule de Billig. Pour cela, des simulations numériques ont été réalisées en faisant varier la température infinie de 50 à 500K.

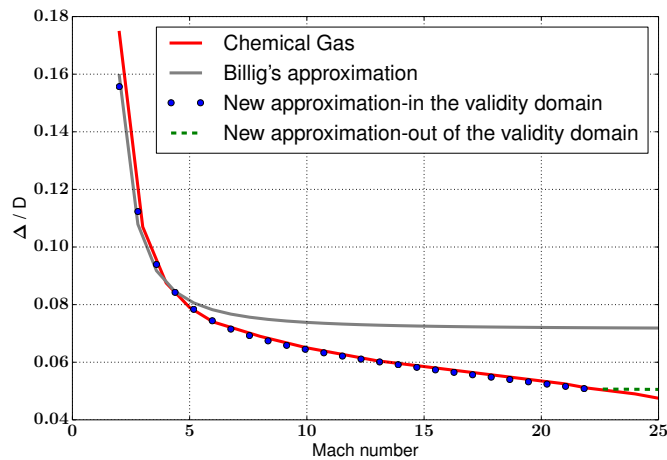


FIGURE 1.18 – Évolution de la distance de choc en fonction du Mach infini pour $T_\infty = 50K$: comparaison entre la formule de Billig et la formule proposée

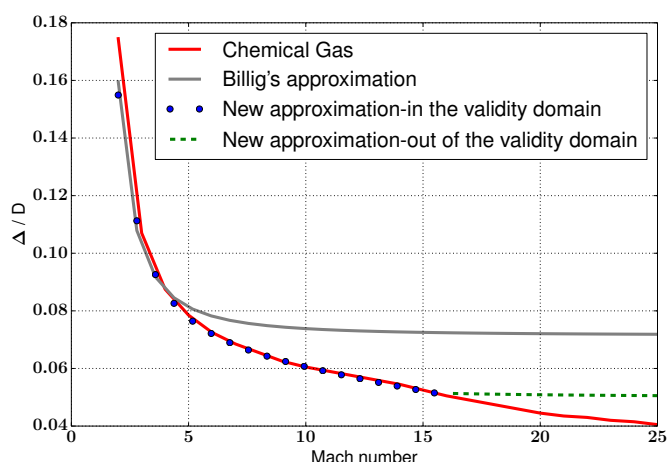


FIGURE 1.19 – Évolution de la distance de choc en fonction du Mach infini pour $T_{\infty} = 100K$: comparaison entre la formule de Billig et la formule proposée

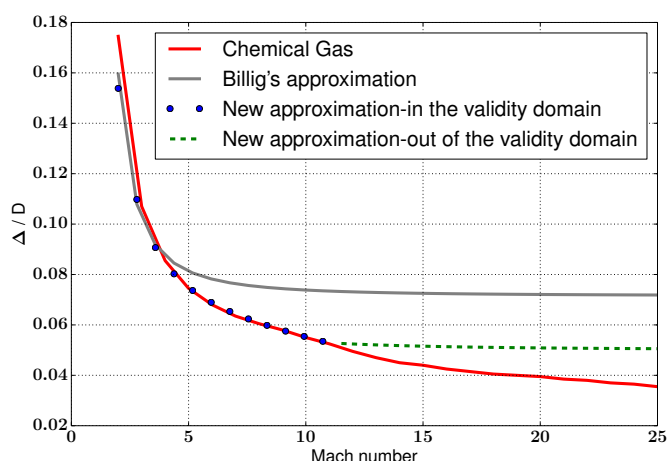


FIGURE 1.20 – Évolution de la distance de choc en fonction du Mach infini pour $T_{\infty} = 200K$: comparaison entre la formule de Billig et la formule proposée

Les six figures 1.18-1.23 mettent en évidence la nette amélioration apportée par la nouvelle formule. Les figures 1.18 et 1.19, correspondant à des températures infinies de 50 et 100K, montrent la transition entre les deux états asymptotiques. Lorsque la température infinie amont augmente, le comportement de $\frac{\Delta}{D}$ se rapproche du cas asymptotique $\gamma = 1.29$. L'augmentation de la température infinie restreint le domaine de validité de la formule. En effet, plus la température infinie est grande, plus la température en zone post-choc l'est aussi et plus les effets de dissociation, ionisation, ... deviennent importants. Il est possible de déterminer de manière théorique cette restriction : la formule est valable tant que la dissociation n'a pas d'effets notoires, ce qui est le cas lorsque les températures post-choc sont inférieures à 4000 K. Pour une température T_{∞} donnée, le

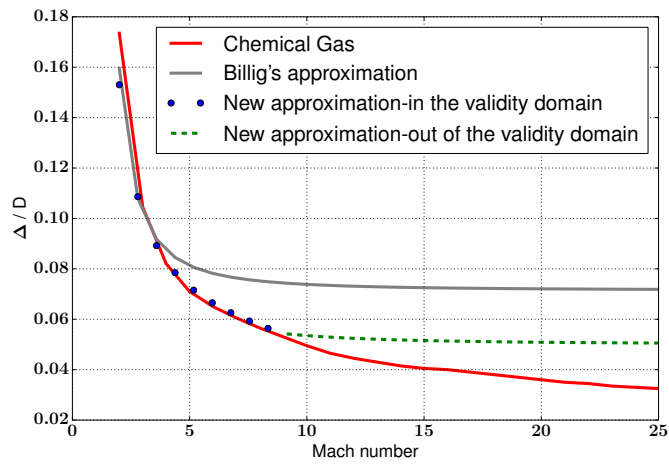


FIGURE 1.21 – Évolution de la distance de choc en fonction du Mach infini pour $T_\infty = 300K$: comparaison entre la formule de Billig et la formule proposée

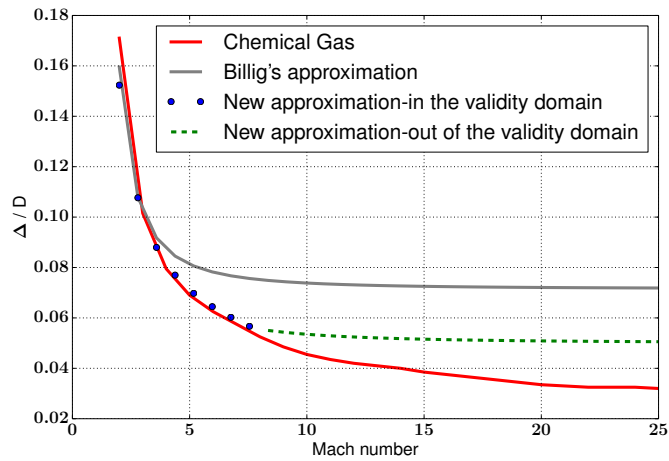


FIGURE 1.22 – Évolution de la distance de choc en fonction du Mach infini pour $T_\infty = 400K$: comparaison entre la formule de Billig et la formule proposée

domaine de validité est calculé grâce à la formule (1.55). Le coefficient γ est considéré constant et pris à la valeur 1.29, correspondant aux hautes températures.

La validité de la formule est donc donnée par la relation suivante :

$$T_{pc} < T_0 \Rightarrow M_\infty < \sqrt{\frac{7T_0}{T_\infty}} \quad (1.65)$$

Ci-dessous, le tableau 1.5 récapitule le domaine de validité de la formule en fonction de la température infinie. La validité théorique (calculée avec la formule (1.65)) et la validité

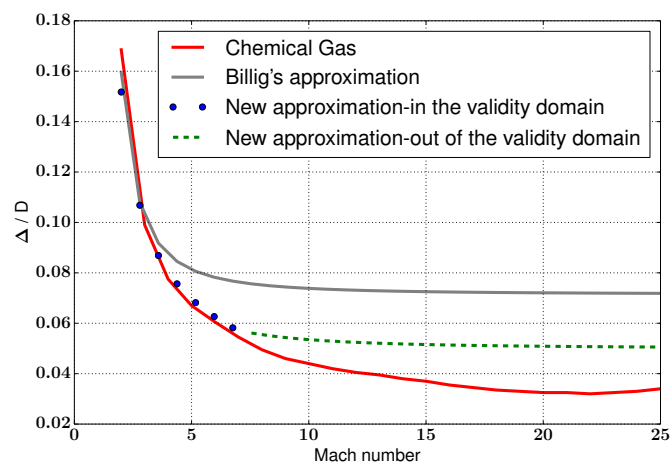


FIGURE 1.23 – Évolution de la distance de choc en fonction du Mach infini pour $T_{\infty} = 500K$: comparaison entre la formule de Billig et la formule proposée

constatée sont en accord. La validité de la corrélation de Billig est aussi rappelée. L'intérêt de la nouvelle formule apparaît là encore clairement.

Température infinie	Plage de validité théorique	Plage de validité constatée	Plage de validité de la formule de Billig
50 K	24	> 23	6
100 K	17	17	5
200 K	12	12	4
300 K	10	9	3
400 K	8	8	3
500 K	7	7	3

TABLE 1.5 – Domaine de validité de la formule proposée et de celle de Billig

En conclusion, la formule proposée est la suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\Delta}{D} = 0.07 + \frac{0.35}{M_\infty^2} - 0.02 \min \left(1, \sqrt{\frac{T_\infty 0.169 M_\infty^2}{T_0}} \right) \\ T_0 = 4000K \\ M_\infty < \sqrt{\frac{7 T_0}{T_\infty}} \end{array} \right. \quad (1.66)$$

1.5 Conclusion

Dans ce premier chapitre, nous avons exposé les phénomènes physiques qui se produisent dans le fluide et, en particulier, le comportement de l'air sous haute température. Ensuite, une description des équations permettant sa modélisation a été proposée. Enfin, nous nous sommes plus particulièrement focalisés sur le cas d'un écoulement supersonique autour d'une sphère. Cette étude nous a conduit à proposer une amélioration de la formule de Billig qui soit valide pour des écoulements de gaz réel à haute température. Dans le chapitre suivant, nous considérerons le comportement global du brouillard et, en particulier, nous décrirons les équations qui permettent de le modéliser.

Chapitre 2

Modélisation du brouillard de particules

Sommaire

Nomenclature du chapitre 2	42
2.1 Modélisation des phénomènes physiques à l'échelle d'une particule	45
2.1.1 Forces aérodynamiques s'appliquant sur une particule	45
2.1.2 Échange de chaleur et de matière avec le gaz : effets thermiques s'appliquant sur une particule	51
2.1.3 Caractérisation de l'interaction particules-paroi	58
2.1.4 Étude de l'influence des collisions entre les particules	59
2.1.5 Description du phénomène de fragmentation d'une particule liquide	61
2.2 Équation de Williams-Boltzmann associée au brouillard	68
2.2.1 Expression des termes Φ_v , Φ_d et Φ_e	69
2.2.2 Discrétisation dans l'espace des phases $(\mathbf{v}_p, d_p, e_p, \Psi_p)$	72
2.2.3 Équations générales du système multi-classes	77
2.3 Conclusion	80

Nomenclature du chapitre 2

Lettres romanes		Unité
c_f	Vitesse du son dans le fluide	$m.s^{-1}$
p_f	Pression du fluide	$kg.m^{-1}.s^{-2}$
T_f	Température du fluide	K
\mathbf{u}_f	Vitesse du fluide	$m.s^{-1}$
$c_{p,p}$	Capacité thermique massique à pression constante	$m.s^{-2}.K^{-1}$
d_p	Diamètre de la (des) particule(s)	m
e_p	Energie interne par unité de masse de la (des) particule(s)	$m^2.s^{-2}$
\mathbf{F}_d	Force de traînée subit par la(les) particule(s)	$kg.m.s^{-2}$
h_p	Enthalpie par unité de masse de la (des) particule(s)	$m^2.s^{-2}$
L_v	Chaleur latente de la (des) particule(s)	$m^2.s^{-2}$
m_p	Masse d'une particule	kg
n	Nombre de particules par unité de volume	m^{-3}
T_{eb}	Température d'ébullition de la (des) particule(s)	K
T_p	Température de la (des) particule(s)	K
\mathbf{v}_p	Vitesse de la (des) particule(s)	$m.s^{-1}$
$v_{p,\infty}$	Vitesse de la (des) particule(s) avant le choc	$m.s^{-1}$

Lettres grecques

Δ	Distance choc-point d'arrêt	m
λ_f	Conductivité thermique du fluide	$kg.m^{-1}.s^{-3}.K^{-1}$
μ_f	Viscosité dynamique du fluide	$kg.m^{-1}.s^{-1}$
ρ_f	Densité du fluide	$kg.m^{-3}$
ρ_p	Densité de la (des) particule(s)	$kg.m^{-3}$
σ_p	Tension superficielle de la (des) particule(s)	$kg.s^{-2}$
τ_{ch}	Temps caractéristique de chauffage	s
τ_{ev}	Temps caractéristique d'évaporation	s
τ_{th}	Temps caractéristique des effets thermiques	s
τ_{res}	Temps de résidence de la (des) particule(s)	s
τ_{Ra}	Temps caractéristique de Rayleigh	s

Nombres sans dimension

B_T	Nombre de Spalting
C_D	Coefficient de traînée de la (des) particule(s)
Ma_p	Nombre de Mach particulaire
Nu^*	Nombre de Nusselt
Oh	Nombre d'Ohnesorge
Re_p	Nombre de Reynolds particulaire
Pr	Nombre de Prandtl
We	Nombre de Weber
α	Fraction volumique de particules au sein du fluide
Ψ_p	Facteur de forme de la (des) particule(s)

Dans ce chapitre, nous présentons les équations permettant de modéliser le comportement du brouillard de particules. L'obtention des équations se fait en deux temps. Nous considérons tout d'abord le cas d'une particule isolée, puis nous généralisons la modélisation au cas d'un brouillard de particules grâce à une approche statistique. L'écoulement étudié étant maintenant composé de deux phases (fluide et particulaire), nous utiliserons les indices f pour désigner les quantités liées au fluide et p pour désigner celles liées aux particules.

2.1 Modélisation des phénomènes physiques à l'échelle d'une particule

Les particules sont supposées à l'équilibre thermodynamique avec le fluide avant le choc détaché. Du fait de leurs inerties thermique et dynamique, elles se retrouvent en déséquilibre après le choc. Lorsque le déséquilibre dynamique est trop important, les particules peuvent se fragmenter sous l'action des forces aérodynamiques. Elles peuvent également collisionner entre elles. Dans cette partie, nous allons décrire ces phénomènes, évaluer leur importance relative, et proposer une modélisation pour chacun d'eux.

2.1.1 Forces aérodynamiques s'appliquant sur une particule

2.1.1.1 Bilan des forces

Dans le cas général, la force exercée par le fluide porteur sur une particule est complexe à calculer. Elle est la somme de nombreuses contributions (ref [6], [73]) appelées force de flottabilité, force de traînée stationnaire, force d'histoire ou force de Basset, force de masse ajoutée, force de Tchen, et force de portance.

Dans le cas où la particule a une densité nettement supérieure au fluide porteur, la force de traînée est prédominante devant les autres [16]. Dans la suite du manuscrit, nous considérerons donc que la particule n'est soumise qu'à la force de traînée, dont nous rappelons l'expression pour une sphère rigide :

$$\mathbf{F}_d = \frac{\pi}{8} d_p^2 \rho_f C_D \|\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p\| (\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p) \quad (2.1)$$

où d_p représente le diamètre de la particule, ρ_f la densité du fluide, C_D le coefficient de traînée, \mathbf{u}_f et \mathbf{v}_p les vitesses du fluide et de la particule. Dans le cas où la particule se déforme, l'expression de la force peut se ramener à celle de l'équation (2.1) en introduisant un paramètre de sphéricité Ψ^1 , compris entre 0 et 1. Les effets de la déformation sont pris en compte dans le coefficient de traînée qui devient une fonction de Ψ .

L'expression de la force de traînée s'écrit alors :

$$\mathbf{F}_d = \frac{\pi}{8} d_p^2 \rho_f C_D^{def}(\Psi) \|\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p\| (\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p) \quad (2.2)$$

Plus de détails sur la prise en compte de la non-sphéricité peuvent être trouvés dans [37, 90]. Dans la suite du manuscrit, nous considérerons que le coefficient de traînée d'une

1. Nous pouvons, selon les applications et la connaissance plus ou moins précise de la forme des particules, introduire plusieurs paramètres $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_q$ pour caractériser la non-sphéricité de la particule. Cela revient à supposer que $\Psi \in \mathbb{R}^q$

particule déformable C_D^{def} peut s'écrire comme le produit du coefficient de traînée d'une particule sphérique rigide C_D par une fonction g dépendant du paramètre de sphéricité Ψ . La déformation étant principalement liée à la fragmentation, nous expliciterons g lors de la description de ce phénomène.

$$C_D^{def} = C_D g(\Psi) \quad (2.3)$$

2.1.1.2 Expression du coefficient de traînée pour une sphère rigide

L'expression du coefficient de traînée ne peut être calculée de manière explicite. Cependant, lorsque l'écart de vitesse entre la particule et l'écoulement est faible, il est possible de le calculer en négligeant le terme non-linéaire [33] des équations de Navier-Stokes. Son expression vaut alors :

$$C_D = \frac{24}{Re_p} \quad (2.4)$$

où Re_p désigne le nombre de Reynolds particulaire. Il représente le rapport des forces d'inerties et des forces de viscosité et a pour expression :

$$Re_p = \frac{d_p \rho_f \|\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p\|}{\mu_f} \quad (2.5)$$

avec μ_f la viscosité du fluide.

Lorsque la vitesse est importante, il n'est plus possible de calculer le coefficient de traînée de manière explicite. Il faut alors utiliser des lois empiriques basées sur des mesures du coefficient de traînée en fonction du nombre de Reynolds particulaire. Il existe de nombreuses lois empiriques, nous rappelons ici l'une des plus connues et des plus éprouvées, celle de Clift et Gauvin [63] :

$$C_D = \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15 Re_p^{0.687}) + \frac{0.42}{1 + 42500 Re_p^{-1.16}} \quad (2.6)$$

Cette expression est valable tant que l'écoulement relatif par rapport à la particule est subsonique. Si l'écart de vitesse entre l'écoulement et la particule est tel que le nombre de Mach particulaire Ma_p est supérieur à 1, cette formule n'est pas correcte. En effet, comme nous l'avons vu au chapitre précédent, il y a alors un choc détaché devant la particule qui vient changer la répartition de la pression autour de celle-ci, et donc par conséquent la valeur du coefficient de traînée. Dans cette configuration, il convient d'utiliser des formules adaptées, qui sont alors fonction du nombre de Reynolds particulaire et du

nombre de Mach particulaire :

$$Ma_p = \frac{\|\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p\|}{c_f} \quad (2.7)$$

où c_f désigne la célérité du son dans le fluide en amont du choc détaché devant la particule.

Il existe dans la littérature deux formules pour calculer le coefficient d'une sphère plongée dans un écoulement supersonique : la formule de Swain [80] et la formule d'Henderson [38]. Nous rappelons ci-dessous l'expression de ces deux formules.

Formule d'Henderson Dans le cas de la formule d'Henderson, la valeur du coefficient de traînée est définie par morceaux pour chaque régime (subsonique et supersonique) avec un raccord linéaire entre les deux :

$$C_D = \begin{cases} \text{Pour } Ma_p < 1.0 & : \frac{24}{Re_p + Ma_p \sqrt{\frac{\gamma}{2}} \left\{ 4.33 + \frac{3.65 - 1.53 T_p/T_f}{1 + 0.35 T_p/T_f} \right\} \exp\left(-0.247 \frac{Re_p}{Ma_p \sqrt{\frac{\gamma}{2}}}\right)} \\ & + \exp\left(-0.5 \frac{Ma_p}{\sqrt{Re_p}}\right) \left\{ \frac{4.5 + 0.38 (0.03 Re_p + 0.48 \sqrt{Re_p})}{1 + 0.03 Re_p + 0.48 \sqrt{Re_p}} + 0.1 Ma_p^2 + 0.2 Ma_p^8 \right\} \\ & + 0.6 Ma_p \sqrt{\frac{\gamma}{2}} \left\{ 1 - \exp\left(\frac{-Ma_p}{Re_p}\right) \right\} \\ \text{Pour } Ma_p > 1.75 & : \frac{0.9 + \frac{0.34}{Ma_p^2} + 1.86 \sqrt{\frac{Ma_p}{Re_p}} \left(2 + \frac{2}{(Ma_p \sqrt{\frac{\gamma}{2}})^2} + \frac{1.058}{Ma_p \sqrt{\frac{\gamma}{2}}} \sqrt{\frac{T_p}{T_f}} - \frac{1}{(Ma_p \sqrt{\frac{\gamma}{2}})^4} \right)}{1 + 1.86 \sqrt{\frac{Ma_p}{Re_p}}} \\ \text{Pour } Ma_p \in [1.0, 1.75] & : C_D(Ma_p = 1.0) + \frac{4}{3} (Ma_p - 1) (C_D(Ma_p = 1.75) - C_D(Ma_p = 1.0)) \end{cases} \quad (2.8)$$

où T_p/T_f représente le rapport entre la température de la particule et celle du fluide et γ représente l'indice adiabatique du fluide.

Formule de Swain De manière analogue à la formule de Henderson, le coefficient de traînée est défini par morceaux :

$$C_D = \begin{cases} \text{Pour } Ma_p < 0.6 & : C_D = C_D^1(Re_p) \\ \text{Pour } Ma_p > 1.3 & : C_D = C_D^2(Re_p) \\ \text{Pour } Ma_p \in [0.6, 1.3] & : C_D = C_D^1(Re_p) + \frac{7}{10} (Ma_p - 0.6)(C_D^2(Re_p) - C_D^1(Re_p)) \end{cases} \quad (2.9)$$

où C_D^1 correspond alors au coefficient de traînée dans le cas d'un écoulement subsonique :

$$C_D^1 = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} & \text{pour } 0 < Re_p < 0.5 \\ \frac{27.17}{Re_p^{0.821}} & \text{pour } 0.5 < Re_p < 10 \\ \frac{15.268}{Re_p^{0.571}} & \text{pour } 10 < Re_p < 100 \\ \frac{6.877}{Re_p^{0.398}} & \text{pour } 100 < Re_p < 1000 \\ 0.44 & \text{pour } Re_p > 1000 \end{cases} \quad (2.10)$$

et C_D^2 celui d'un écoulement supersonique :

$$C_D^2 = 1 + 4.66Re_p^{-0.5} \quad (2.11)$$

Nous avons décidé d'utiliser la formule de Swain plutôt que celle d'Henderson. En effet, la formule d'Henderson permet de calculer le coefficient de traînée C_D en fonction de trois paramètres : le Reynolds particulaire, le nombre de Mach particulaire et le rapport entre la température de la particule et la température du fluide T_p/T_f . Dans sa publication, Henderson se base sur des expériences dans lesquelles le rapport T_p/T_f est supérieur à 1. Dans de nombreux articles qui utilisent cette formule, l'hypothèse $T_p/T_f = 1$ est faite. Or dans les applications visées, nous avons vu au chapitre précédent que la température du fluide est généralement extrêmement élevée (de l'ordre de plusieurs milliers de K), il est donc impossible de faire l'hypothèse $T_p/T_f \geq 1$, si bien que la validité de la formule d'Henderson est alors discutable. A l'inverse, la formule de Swain est basée uniquement sur le nombre de Reynolds et le nombre de Mach particuliers.

Coefficient de traînée retenu dans le cadre de l'étude Nous avons choisi de modifier la formule de Swain en remplaçant le calcul de C_D^1 , correspondant à la partie subsonique, par la formule de Clift et Gauvin (cf. Eq. (2.6)), car celle-ci est plus récente et plus largement éprouvée dans le régime subsonique. La formule finale retenue est alors

la suivante :

$$C_D = \begin{cases} \text{Pour } Ma_p < 0.6 & : C_D = C_D^1 = \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15 Re_p^{0.687}) + \frac{0.42}{1 + 42500 Re_p^{-1.16}} \\ \text{Pour } Ma_p > 1.3 & : C_D = C_D^2 = 1.0 + 4.66 Re_p^{-0.5} \\ \text{Pour } Ma_p \in [0.6, 1.3] & : C_D = C_D^1 + \frac{7}{10} (Ma_p - 0.6) (C_D^2 - C_D^1) \end{cases} \quad (2.12)$$

Afin de vérifier que les coefficients obtenus avec cette formule ne sont pas incohérents avec ceux obtenus avec la formule d'Henderson, nous traçons l'évolution du coefficient de traînée en fonction du nombre de Reynolds particulaire. La température de l'écoulement est fixée à $4600K$ et la densité à $4.8kg.m^{-3}$, ce qui correspond à des valeurs classiques en zone post-choc. Les coefficients de traînée de deux particules "test" de 100 et 500 microns de diamètre sont comparés.

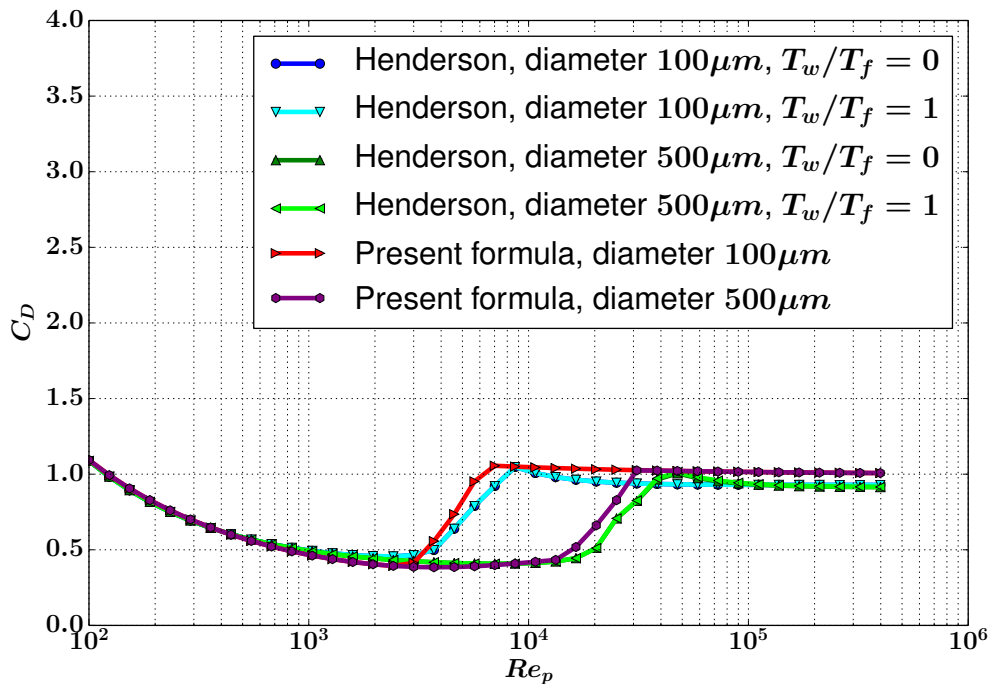


FIGURE 2.1 – Évolution du coefficient de traînée en fonction du Reynolds particulaire pour plusieurs formules

La figure 2.1 permet de valider l'utilisation de la formule proposée. En effet, les différences entre la formule (2.12) et celle d'Henderson sont faibles, situées lors de la transition entre le régime subsonique et le régime supersonique. Cette différence est due au critère de transition adopté pour passer d'un régime à l'autre : il se situe pour un nombre de Mach particulaire de 0.6 dans le cas de la formule retenue (2.12) et pour un nombre de Mach

particulière de 1 dans la formule d'Henderson (2.8). Sur la figure 2.1, nous remarquons clairement les trois zones telles que définies dans les formules : la zone subsonique avec une asymptote qui tend vers $1/2$, le passage d'un régime à l'autre, et le régime supersonique avec une valeur asymptotique qui tend vers 1.

Cette différence de comportement asymptotique, qui peut paraître surprenante au premier abord, trouve son explication en revenant à la définition du coefficient de traînée. Considérons un écoulement autour d'une sphère, dans lequel les effets visqueux sont négligés, i.e. $Re \rightarrow \infty$. La face avant de la sphère est soumise à une pression moyenne, notée p_{moy} . Notons $\Delta p_{moy} = p_{moy} - p_\infty$ la différence entre la pression moyenne et la pression amont. Le comportement asymptotique du coefficient de traînée de la sphère est défini par :

$$\lim_{Re \rightarrow \infty} C_D \simeq \frac{\Delta p_{moy}}{p_D} \quad (2.13)$$

avec p_D la pression dynamique infinie du fluide $p_D = \frac{1}{2} \rho_\infty \|\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p\|^2$.

où ρ_∞ désigne la densité amont. La pression sur l'extrados et l'intrados de la sphère étant proche de p_∞ , nous ferons l'approximation suivante :

$$\Delta p_{moy} = \frac{p_{pa} - p_\infty}{2} \quad (2.14)$$

où p_{pa} désigne la pression au niveau du point d'arrêt.

Sans perte de généralité, nous pouvons supposer que $\mathbf{v}_p = \mathbf{0}$.

Dans le cas subsonique : nous supposons le fluide incompressible et parfait, ce qui permet d'appliquer le théorème de Bernoulli :

$$p_{pa} = p_\infty + \frac{\rho_\infty u_\infty^2}{2} \quad (2.15)$$

La différence de pression Δp_{moy} vaut donc :

$$\Delta p_{moy} = \frac{p_{pa} - p_\infty}{2} = \frac{\rho_\infty u_\infty^2}{4} = \frac{p_D}{2} \quad (2.16)$$

Le coefficient de traînée vaut alors :

$$\lim_{Re \rightarrow \infty} C_D^{subsonique} \simeq \frac{\Delta p_{moy}}{p_D} = \frac{p_D}{2 p_D} = \frac{1}{2} \quad (2.17)$$

Dans le cas supersonique : la relation de Rankine-Hugoniot nous permet de calculer la pression au point d'arrêt p_{pa} :

$$p_\infty + \rho_\infty u_\infty^2 = p_{pa} + \rho_{pa} u_{pa}^2 \quad (2.18)$$

Comme la vitesse chute fortement après le choc nous pouvons faire l'approximation suivante :

$$p_{pa} \simeq p_\infty + \rho_\infty u_\infty^2 \quad (2.19)$$

La différence de pression Δp_{moy} vaut donc :

$$\Delta p_{moy} = \frac{p_{pa} - p_\infty}{2} = \frac{\rho_\infty u_\infty^2}{2} = p_D \quad (2.20)$$

En revenant au calcul du coefficient de traînée nous obtenons :

$$\lim_{Re \rightarrow \infty} C_D^{supersonique} \simeq \frac{\Delta p_{moy}}{p_D} = \frac{p_D}{p_D} = 1 \quad (2.21)$$

Ce qui permet d'expliquer la différence de comportement asymptotique observée précédemment. Après cette présentation des forces appliquées à la particule, nous allons maintenant étudier les effets thermiques.

2.1.2 Échange de chaleur et de matière avec le gaz : effets thermiques s'appliquant sur une particule

Comme nous l'avons vu au chapitre précédent, la température du fluide dans la zone post-choc est très grande (de l'ordre de quelques milliers de K). Une particule va donc recevoir un flux thermique très important, notée Q_f . Ce flux va provoquer l'échauffement de la particule et son évaporation (ou sa sublimation si elle est solide) (cf. Fig. 2.2).

En première approximation, les effets thermiques peuvent se décomposer en deux phases :

- une phase de chauffage qui permet à la particule d'atteindre sa température d'ébullition (ou de sublimation),
- une phase d'évaporation.

2.1.2.1 Expression des flux thermiques reçus par une particule

Dans la suite de cette partie, nous nous placerons dans les mêmes conditions amont que celles utilisées dans le chapitre 1 (cf. Tab. 1.4 page 24). Nous ferons de plus l'hypothèse d'une capacité thermique de la particule constante. Cette hypothèse est valable puisque la variation de température de la particule est faible par rapport à celle du fluide. La

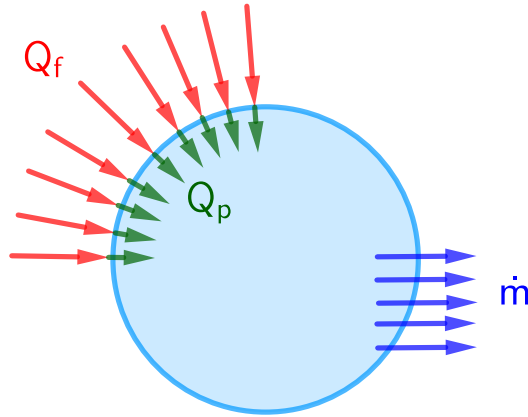


FIGURE 2.2 – Flux thermiques reçus par une particule

température des particules reste comprise entre la température à l'infini amont et la température de changement de phase (quelques centaines de K).

Nous rappelons ici l'expression du flux thermique Q_f pour une particule sphérique rigide et renvoyons à [76] pour plus de détails.

$$Q_f = \pi d_p \lambda_f Nu^* (T_f - T_p) \frac{\ln(1 + B_T)}{B_T} \quad (2.22)$$

où λ_f désigne la conductivité du fluide et B_T le nombre de Spalting :

$$B_T = \frac{\dot{m} c_{p,p} (T_f - T_p)}{\dot{m} L_v(T_p) + Q_p} \quad (2.23)$$

où $c_{p,p}$ désigne la capacité thermique de la particule, L_v sa chaleur latente et \dot{m} la valeur absolue du débit massique évaporé (ou sublimé), Q_p le flux de chaleur transmis à la particule avec, par conservation de l'énergie :

$$Q_f = Q_p + \dot{m} L_v(T_p) \quad (2.24)$$

et Nu^* désigne le nombre de Nusselt d'une particule inerte (sans changement de phase). Dans la littérature plusieurs expressions existent pour calculer le nombre de Nusselt pour des sphères. Nous rappelons ici la corrélation de Ranz-Marshall qui est utilisée dans le cas des écoulements subsoniques : ([64]) :

$$Nu^* = 2 + 0.6 Re_p^{1/2} Pr^{1/3} \quad (2.25)$$

De manière analogue à ce qui est fait pour le coefficient de traînée, il existe des corrélations pour le calcul du nombre de Nusselt adaptées aux écoulements supersoniques. Nous présentons ici la formule proposée par Fox [26] :

$$Nu^* = \frac{2 \exp(-Ma_p)}{1 + 17Ma_p/Re_p} + 0.459 Pr^{0.33} Re_p^{0.55} \frac{1 + 0.5 \exp(-17Ma_p/Re_p)}{1.5} \quad (2.26)$$

Remarque : Notons qu'à l'instar de ce qui est fait pour le coefficient de traînée, il est possible de prendre en compte la déformation de la particule en modifiant le nombre de Nusselt. Cela se fait *via* la fonction de déformation g :

$$Nu^{*def} = Nu^* g(\Psi) \quad (2.27)$$

2.1.2.2 Présentation des principaux modèles de chauffage et d'évaporation

Une fois le flux thermique Q_f connu, il faut calculer les termes Q_p et \dot{m} . Il existe de nombreux modèles permettant d'évaluer ces deux grandeurs. Nous présentons dans un premier temps les deux modèles limites que sont le modèle de conductivité nulle et le modèle de conductivité infinie (cf. Fig. 2.3)

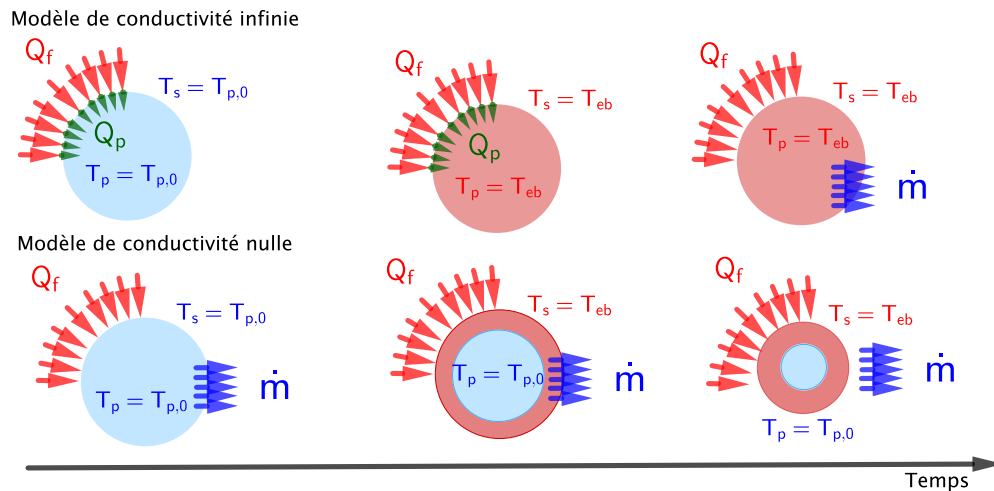


FIGURE 2.3 – Flux thermiques reçus par une particule : comparaison des modèles de conductivité infinie et de conductivité nulle

Modèle dit de "conductivité nulle" Le modèle de conductivité nulle [27, 78] repose sur l'hypothèse suivante : le cœur de la particule reste à température constante et le flux thermique transmis à la particule sert à chauffer instantanément et évaporer la partie superficielle de celle-ci (cf. Fig. 2.3). Dans ce modèle, la conductivité (capacité de diffusion de la chaleur) au sein de la particule est considérée comme nulle si bien que la

température du cœur ne varie pas.

Modèle dit de "conductivité infinie" Dans ce modèle, la diffusion de chaleur à l'intérieur de la particule est supposée instantanée, ce qui revient à supposer infinie la conductivité de la particule. La température de la particule est uniforme mais varie au cours du temps. Une fois que la particule a atteint la température critique (T_{eb} , T_{sub}), elle change de phase.

Modèles plus complexes prenant en compte l'évolution spatio-temporelle de la température au sein de la particule Il existe d'autres modèles plus sophistiqués dans lesquels la température de la particule varie en temps et espace. Nous renvoyons à [50, 72] pour un exposé de ces modèles.

2.1.2.3 Évaluation des temps caractéristiques liés aux effets thermiques

Le choix du modèle thermique dépend fortement du niveau de modélisation souhaité. En effet, si les effets thermiques jouent un rôle prépondérant dans une étude il faudra s'orienter vers des modèles plus complexes du type "modèle à diffusion effective" ou "modèle du Vortex de Hill". A l'inverse, si les effets thermiques ne sont pas primordiaux, les modèles de "conduction nulle" ou de "conduction infinie" sont plus adéquats car moins coûteux à résoudre. Pour choisir le modèle le plus adapté nous avons effectué une analyse des temps caractéristiques de chauffage et d'évaporation.

Calcul du temps caractéristique de chauffage d'une particule Pour calculer l'ordre de grandeur du temps de chauffage, nous avons utilisé le modèle de conduction infinie. En utilisant l'équation (2.24) nous obtenons :

$$\dot{m} = 0 \Rightarrow \begin{cases} Q_f = Q_p \\ B_T = 0 \end{cases} \quad (2.28)$$

L'évolution de la température de la particule au cours du temps est régie par l'équation suivante :

$$m_p c_{p,p} \frac{dT_p}{dt} = \pi d_p \lambda_f Nu^* (T_f - T_p) \quad (2.29)$$

avec

$$m_p = \frac{\pi \rho_p d_p^3}{6} \quad (2.30)$$

Ce qui permet de calculer le temps caractéristique de chauffage τ_{ch} :

$$\begin{aligned} \frac{dT_p}{dt} &= \frac{T_f - T_p}{\tau_{ch}} \\ \tau_{ch} &= \frac{d_p^2 \rho_p c_{p,p}}{6 Nu^* \lambda_f} \end{aligned} \quad (2.31)$$

Calcul du temps caractéristique d'évaporation d'une particule Pour calculer le temps caractéristique d'évaporation, nous ferons l'hypothèse que la particule est à sa température d'ébullition :

$$Q_p = 0 \Rightarrow Q_f = \dot{m} L_v(T_{eb}) \quad (2.32)$$

En utilisant l'équation (2.24), l'évolution de la masse de la particule s'écrit :

$$\frac{dm_p}{dt} = -\dot{m} = \frac{-1}{L_v(T_{eb})} Q_f = \frac{-\pi d_p \lambda_f Nu^* (T_f - T_p)}{L_v(T_{eb})} \frac{\ln(1 + B_T)}{B_T} \quad (2.33)$$

avec ici :

$$B_T = \frac{c_{p,p} (T_f - T_{eb})}{L_v(T_{eb})} \quad (2.34)$$

d'où la définition du temps caractéristique d'évaporation τ_{ev} :

$$\begin{aligned} \frac{dm_p}{dt} &= \frac{-m_p}{\tau_{ev}} \\ \tau_{ev} &= \frac{d_p^2 \rho_p L_v(T_{eb})}{6 Nu^* \lambda_f (T_f - T_p) \frac{\ln(1 + B_T)}{B_T}} \end{aligned} \quad (2.35)$$

La fonction $x \mapsto \frac{\ln(1+x)}{x}$ étant toujours plus petite que 1 pour x positif, il est possible de minorer le temps d'évaporation :

$$\tau_{ev} > \frac{d_p^2 \rho_p L_v(T_{eb})}{6 Nu^* \lambda_f (T_f - T_p)} \quad (2.36)$$

2.1.2.4 Évaluation du temps caractéristique des effets thermiques pour une particule solide

Le temps caractéristique des effets thermiques τ_{th} est la somme du temps caractéristique de chauffage τ_{ch} et du temps caractéristique d'évaporation τ_{ev} :

$$\tau_{th} = \tau_{ch} + \tau_{ev} \quad (2.37)$$

Le calcul du temps caractéristique des effets thermiques seuls ne présente pas un intérêt majeur, il faut le comparer au temps caractéristique de résidence de la particule dans la

zone post-choc τ_{res} :

$$\tau_{res} = \frac{\Delta}{v_{p,\infty}} \quad (2.38)$$

où Δ désigne la distance entre le choc et la sphère, et $v_{p,\infty}$ la vitesse de la particule avant le choc.

Nous traçons ci-dessous (cf. Fig. 2.4) l'évolution du rapport entre le temps caractéristique des effets thermiques et le temps de résidence, en fonction du nombre de Mach et ce pour trois différentes hauteurs auxquelles les particules sont injectées : $y = 0$, $y = R/2$, $y = R$. Le diamètre de la particule est fixé à $100 \mu m$.

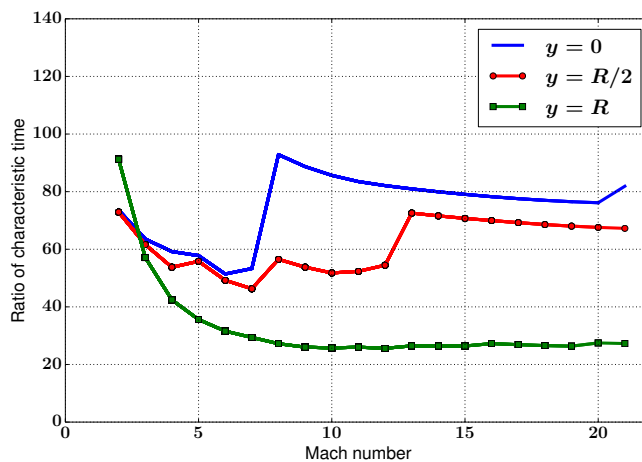


FIGURE 2.4 – Rapport entre le temps caractéristique des effets thermiques et le temps de parcours : évolution en fonction du nombre de Mach amont pour différentes hauteurs

Le temps caractéristique des effets thermiques est nettement supérieur au temps de parcours. Au niveau de la ligne d'arrêt $y = 0$ et au milieu de la sphère $y = R/2$ il est presque cent fois plus grand. A l'extrémité de la sphère $y = R$ il est plus faible mais reste trente fois plus important que le temps de parcours. Pour comprendre la différence entre les ratios des hauteurs $y = 0$, $y = R/2$ et celle de la hauteur $y = R$ nous avons représenté l'évolution du temps des effets thermiques (cf. Fig. 2.5) et du temps de parcours (cf. Fig. 2.6). Le temps caractéristique des effets thermiques varie peu en fonction de la hauteur à laquelle la particule est injectée. A l'inverse, plus la particule est injectée "haut" plus le temps de parcours est grand. Cela explique les différences importantes entre les trois hauteurs d'injection.

L'étude du temps caractéristique des phénomènes thermiques permet d'affirmer qu'ils ne seront pas prédominants dans l'étude du comportement de la particule. C'est pourquoi une description fine de la température de la particule n'est pas nécessaire et l'utilisation des modèles simplifiés est suffisante. Dans le code SDFS (Supersonic Dilute Flow Solver),

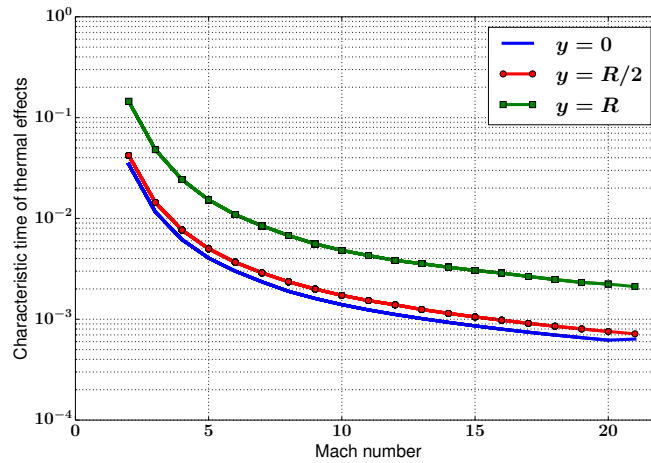


FIGURE 2.5 – Temps caractéristique des effets thermiques : évolution en fonction du nombre de Mach amont pour différentes hauteurs

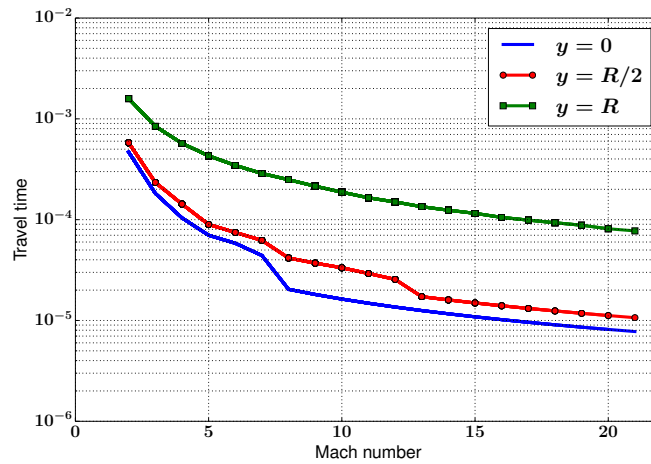


FIGURE 2.6 – Temps caractéristique de parcours : évolution en fonction du nombre de Mach amont pour différentes hauteurs

les deux modèles englobants (modèle de conduction nulle et modèle de conduction infinie) ont été implémentés afin de pouvoir majorer et minorer les effets thermiques. En effet, la conductivité réelle est forcément comprise entre zéro et l'infini. En supposant que les effets thermiques varient de manière monotone, ils sont forcément compris entre les résultats de ces deux modèles. Après cette présentation des effets thermiques appliqués sur la particule, intéressons nous à l'interaction entre la particule et la paroi.

2.1.3 Caractérisation de l'interaction particules-paroi

La modélisation des interactions particules-paroi est un problème très difficile qui fait l'objet de nombreuses recherches ([23, 24, 40, 77]). Il s'agit de prendre en compte des phénomènes complexes tels que le "splashing" ou l'érosion de la paroi, le dépôt partiel avec dans chaque cas réémission de particules secondaires. Dans le cadre de la thèse, nous nous sommes limités à une modélisation simple. Nous avons considéré que tout impact conduisait à la réémission de particules secondaires issues à la fois de l'érosion de la paroi et de la fragmentation de la particule impactante.

Afin de prendre en compte les différents phénomènes pouvant se produire, nous avons introduit cinq paramètres ϵ_n , ϵ_t , F , E et H :

- ϵ_n , ϵ_t sont les coefficients de restitution normal et tangentiel permettant de restituer la diminution de vitesse lors de l'impact,
- F est un paramètre de gain/perte en nombre de particules. Il sert à prendre en compte les phénomènes d'érosion et de fragmentation ($F > 1$),
- G est un paramètre de gain/perte en masse des particules qui sert à modéliser l'érosion de la paroi ($G > 1$) ou le dépôt partiel ($G < 1$),
- H est un paramètre de gain/perte d'énergie interne lors de l'impact.

Notons alors n_i , m_i , \mathbf{v}_i , h_i la concentration en nombre (nombre de particules par unité de volume), la masse d'une particule, la vitesse et l'enthalpie des particules incidentes et n_r , m_r , \mathbf{v}_r , h_r celles des particules secondaires réémises après l'impact. Avec \mathbf{n} , \mathbf{t} respectivement le vecteur normal et tangentiel à la paroi (cf. Fig. 2.7), nous avons les relations suivantes :

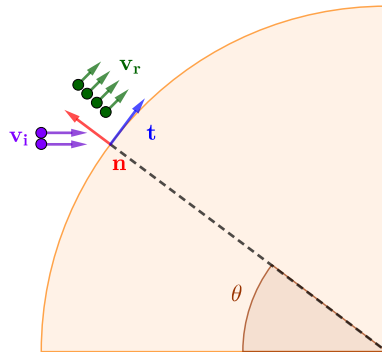


FIGURE 2.7 – Interaction des particules avec la paroi

$$\begin{cases} \mathbf{v}_r \cdot \mathbf{n} = \epsilon_n \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{n} \\ \mathbf{v}_r \cdot \mathbf{t} = \epsilon_t \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{t} \\ \epsilon_n n_r m_r = G n_i m_i \\ \epsilon_n n_r = F n_i \\ h_r = H h_i \end{cases} \quad (2.39)$$

En effet, par définition, le flux massique des particules secondaires est donné par :

$$\dot{m}_r = n_r m_r \mathbf{v}_r \cdot \mathbf{n} = m_r n_r \epsilon_n \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{n} \quad (2.40)$$

Sachant que par définition :

$$\dot{m}_r = G \dot{m}_i = G m_i n_i \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{n} \quad (2.41)$$

nous pouvons en déduire la relation :

$$\epsilon_n n_r m_r = G n_i m_i \quad (2.42)$$

De même, en raisonnant sur le flux en nombre au lieu du flux en masse, nous avons :

$$\epsilon_n n_r = F n_i \quad (2.43)$$

Ces cinq relations nous permettent de prendre en compte l'interaction des particules avec la paroi ainsi que l'effet de l'érosion de la paroi.

2.1.4 Étude de l'influence des collisions entre les particules

Dans cette partie, nous allons calculer la probabilité de collision entre deux particules afin d'évaluer leur importance relative pour les applications visées. Pour cela considérons une particule p de diamètre d_p et de vitesse \mathbf{v}_p . Pour qu'une particule i de diamètre d_i et de vitesse \mathbf{v}_i entre en collision avec la particule p pendant un temps Δt , il faut qu'elle se situe dans le cylindre de collision de diamètre $d_p + d_i$ et de hauteur $\|\mathbf{v}_p - \mathbf{v}_i\| \Delta t$ (cf. Fig 2.8).

La probabilité de collision entre la particule p et la particule i vaut alors [71, 73] :

$$P_{coll} = n_i \frac{\pi}{4} (d_p + d_i)^2 \|\mathbf{v}_p - \mathbf{v}_i\| E_{coll}(d_p, d_i, \|\mathbf{v}_p - \mathbf{v}_i\|) \Delta t \quad (2.44)$$

avec n_i le nombre de particules par unité de volume. E_{coll} est appelée efficacité de collision. Elle permet de prendre en compte les différents phénomènes qui rendent la collision

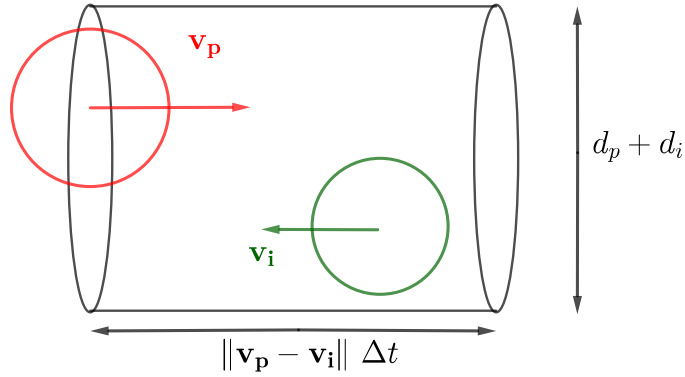


FIGURE 2.8 – Cylindre de collision

moins efficace, notamment la déviation de trajectoire lorsque les deux particules se rapprochent. Ce terme est toujours compris entre 0 et 1. En supposant que la vitesse relative entre deux particules est faible devant la vitesse amont $v_{p,\infty}$, la probabilité de collision entre deux particules de même diamètre d peut-être majorée par la quantité suivante :

$$P_{coll} < n \frac{\pi}{4} d^2 v_{p,\infty} \Delta t \quad (2.45)$$

Introduisons alors α la fraction volumique de particules :

$$\alpha = n \frac{\pi}{6} d^3 \quad (2.46)$$

Il est possible de réécrire l'expression précédente :

$$P_{coll} < \frac{\alpha}{\frac{\pi}{6} d^3} \frac{\pi}{4} d^2 v_{p,\infty} \Delta t \quad (2.47)$$

Introduisons maintenant le temps caractéristique de collision τ_{coll} . En utilisant le fait que par définition $P_{coll} = 1$ pour $\Delta t = \tau_{coll}$, la relation (2.47) nous permet alors d'écrire la majoration suivante :

$$\tau_{coll} > \frac{2}{3} \frac{d}{\alpha v_{p,\infty}} \quad (2.48)$$

Nous traçons ci-dessous (cf. Fig. 2.9), l'évolution du rapport entre le temps caractéristique de collision et le temps de résidence. Là encore nous effectuons les calculs pour trois hauteurs différentes, pour différents nombres de Mach et pour $\alpha = 10^{-6}$ (valeur typique des applications envisagées).

Le rapport entre le temps caractéristique de collision et le temps de résidence est suffisamment grand (au moins une dizaine de fois plus grand) pour négliger les collisions.

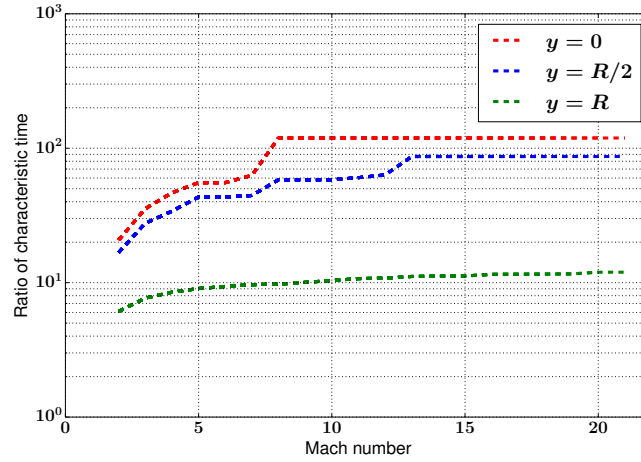


FIGURE 2.9 – Probabilité de collision : évolution en fonction de la position au niveau de la ligne d’arrêt, $\alpha = 10^{-6}$ et $d = 100\mu m$

C’est l’hypothèse qui est faite dans la suite du manuscrit. Dans la partie suivante, nous allons nous intéresser au phénomène de fragmentation.

2.1.5 Description du phénomène de fragmentation d’une particule liquide

Comme nous l’avons décrit précédemment, après le passage du choc, la particule se trouve en fort déséquilibre avec le gaz. S’il s’agit d’une particule liquide, les contraintes aérodynamiques qu’elle subit vont mener à sa fragmentation. Dans cette partie, nous ferons des rappels généraux sur le phénomène de fragmentation et introduirons certains des modèles utilisés dans le chapitre 4, dédié à l’étude et à la modélisation détaillée du phénomène dans le cas des écoulements supersoniques. La fragmentation, aussi appelée atomisation secondaire, a fait l’objet de nombreuses études, en particulier dans le cadre de la modélisation des moteurs Diesel [34, 68]. La caractérisation de la fragmentation se fait en utilisant le nombre sans dimension de Weber représentant le rapport entre les forces d’inertie et de tension superficielle :

$$We = \frac{d_p \rho_f \|\mathbf{v}_p - \mathbf{u}_f\|^2}{\sigma_p} \quad (2.49)$$

où σ_p est la tension superficielle du liquide. Il semble assez naturel d’introduire ce nombre. En effet, plus la différence de vitesses est grande plus les forces aérodynamiques proportionnelles à $\rho_f \|\mathbf{v}_p - \mathbf{u}_f\|^2 d_p^2$ vont être importantes et vont mener à la fragmentation de la particule. A l’inverse, plus les forces de tension de surface (proportionnelles à $\sigma_p d_p$)

sont grandes, plus la particule pourra "résister" à la fragmentation. Pour illustrer l'importance de ce nombre, considérons le cas très simplifié de l'écoulement d'un fluide parfait incompressible de vitesse \mathbf{u}_f autour d'une particule de diamètre d_p initialement au repos.

L'utilisation du théorème de Bernoulli nous permet d'accéder au différentiel de pression du fluide entre l'avant p_{av} et l'arrière p_{ar} de la particule :

$$p_{av} - p_{ar} = \Delta p_f = \frac{\rho_f}{2} \|\mathbf{u}_f\|^2 \quad (2.50)$$

C'est ce différentiel de pression qui entraîne la déformation de la particule. Pour quantifier cette déformation, revenons à l'expression de la différence de pression entre l'intérieur p_{int} et extérieure p_{ext} d'une particule de tension superficielle σ_p et de diamètre d_p . D'après la loi de Laplace nous avons la relation suivante :

$$p_{int} - p_{ext} = \frac{4\sigma_p}{d_p} \quad (2.51)$$

En considérant la pression p_{int} constante au sein de la particule, il apparaît clairement que le diamètre de la particule doit varier. En effet, nous avons alors les deux relations suivantes :

$$\begin{cases} p_{int} - p_{av} = \frac{4\sigma_p}{d_{av}} \\ p_{int} - p_{ar} = \frac{4\sigma_p}{d_{ar}} \end{cases} \quad (2.52)$$

En écrivant le diamètre arrière d_{ar} comme une petite déformation du diamètre avant d_{av} , ie $d_{ar} = d_{av} + \Delta d_p$, il est possible de relier la déformation en diamètre à la différence de pression du fluide :

$$\Delta p_f \simeq \frac{4\sigma_p \Delta d_p}{d_p^2} \quad (2.53)$$

La particule ne pouvant pas se déformer indéfiniment elle va se fragmenter dès lors que le ratio $\Delta d_p/d_p$ devient supérieur à une valeur critique, notée Δ^{max} . Il est alors possible de déterminer un critère de fragmentation de la particule :

$$\frac{\Delta d_p}{d_p} > \Delta^{max} \Rightarrow \frac{1}{8} \frac{d_p \rho_f \|\mathbf{u}_f\|^2}{\sigma_p} > \Delta^{max} \Rightarrow We > 8 \Delta^{max} \quad (2.54)$$

Le nombre de Weber apparaît alors naturellement comme un critère de fragmentation. Ce nombre au-delà duquel la fragmentation apparaît ($8 \Delta^{max}$ dans l'exemple précédent) est appelé Weber critique : c'est le Weber à partir duquel il y a fragmentation de la particule. Dans la littérature, le ratio critique Δ^{max} étant pris aux alentours de 1 [1, 59], le nombre de Weber critique est de 8. En réalité, d'après les études expérimentales, il

est aux alentours de 12 et dépend de la viscosité de la particule [61]. Les études sur la fragmentation ont permis de déterminer cinq modes de fragmentation en fonction du nombre de Weber [61] comme représentés sur la figure 2.10.

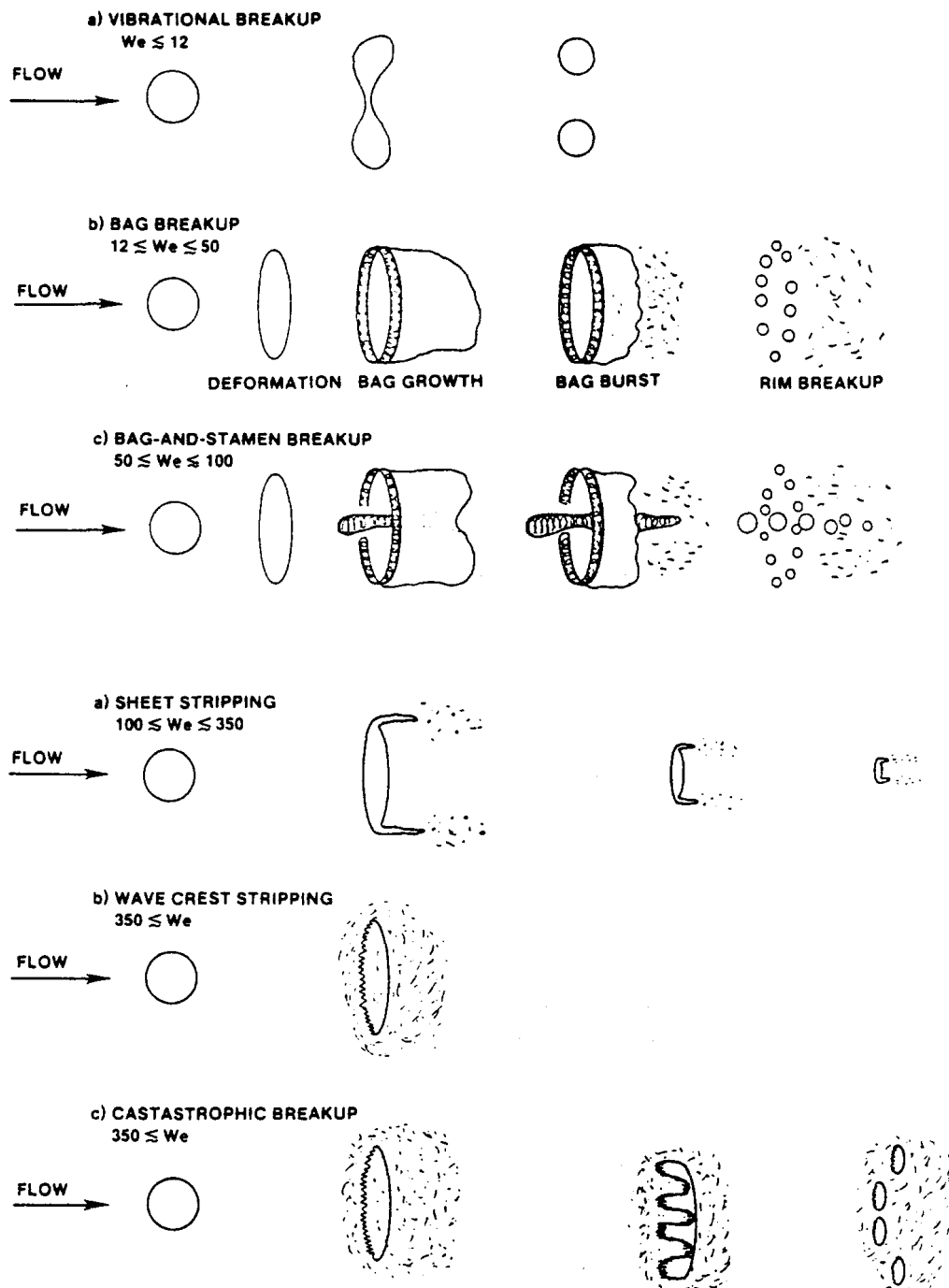


FIGURE 2.10 – Classification des différents modes de fragmentation ([61])

2.1.5.1 Quelques modes de fragmentation

Vibrationnal breakup ($We \leq 12$) (premier mode sur la figure 2.10) Pour de faibles différences de vitesses, la particule se déforme en gardant sa cohésion. Elle se met à osciller et peut fragmenter, donnant naissance à des fragments appelés particules filles, de taille semblable à celle de la particule initiale, appelée particule mère.

Bag breakup $12 \leq We \leq 50$ (deuxième mode sur la figure 2.10) La particule se déforme et forme un 'sac' qui éclate en petites particules ne laissant qu'un anneau. Cet anneau se casse quelques temps après en formant des petites particules.

Bag and stamen breakup $50 \leq We \leq 100$ (troisième mode sur la figure 2.10) La différence avec le modèle précédent est la présence d'un jet au centre de l'anneau.

Stripping breakup $100 \leq We \leq 350$ (quatrième mode sur la figure 2.10) La particule se déforme, les extrémités de celle-ci forment un film qui donne naissance à des particules de petites tailles. Ce processus a lieu jusqu'à ce que la taille de la particule devienne stable.

Catastrophic breakup $We \geq 350$ (cinquième mode sur la figure 2.10) Ce mode correspond au moment où les instabilités présentes au sein de la particule sont suffisantes pour faire éclater la particule mère. Tant que la particule n'est pas stable, ce processus continue.

2.1.5.2 Temps caractéristique de breakup

Une des caractéristiques importantes de la fragmentation est sa durée totale. Elle commence dès l'apparition de perturbations à la surface des particules et se termine par la création de nouvelles particules. Ce temps est appelé temps de fragmentation, noté τ_{frag} . Dans certaines études, le temps de fragmentation est tellement rapide devant les autres temps caractéristiques que la fragmentation est supposée instantanée. Dans notre cas, nous verrons qu'il est comparable aux autres temps caractéristiques. De nombreuses corrélations existent pour calculer le temps de fragmentation. La plupart de celles-ci définissent le temps de fragmentation comme un multiple du temps caractéristique τ_{Ra} de Rayleigh, défini par la relation suivante :

$$\tau_{Ra} = \frac{d_p}{\|\mathbf{v}_p - \mathbf{u}_f\|} \sqrt{\frac{\rho_p}{\rho_f}}$$

L'utilisation de ce temps est historique car les premières études sur la fragmentation étaient basées sur le développement et l'accroissement d'instabilités de type Rayleigh-Taylor à la surface de la particule. Le temps caractéristique de développement de ces instabilités étant τ_{Ra} , c'est à partir de celui-ci que les corrélations ont été basées.

Pilch et Erdman [61] définissent le temps de fragmentation en fonction du nombre de Weber :

$$\tau_{frag} = \tau_{Ra} \begin{cases} 6 (We - 12)^{-0.25} & 12 < We < 18 \\ 2.45 (We - 12)^{0.25} & 18 < We < 45 \\ 14.1 (We - 12)^{-0.25} & 45 < We < 351 \\ 0.766 (We - 12)^{0.25} & 351 < We < 2670 \\ 5.5 & We > 2670 \end{cases} \quad (2.55)$$

D'autres corrélations prennent en compte la viscosité de la particule ([28, 58, 61]). Nous rappelons l'expression de Nigmatulin [58] qui prend en compte les effets visqueux au sein de la particule *via* le nombre d'Ohnesorge qui représente le rapport des forces visqueuses avec la tension superficielle et les forces d'inerties :

$$Oh = \frac{\mu_p}{\sqrt{\rho_p \sigma_p d_p}} \quad (2.56)$$

Dans ce cas, le temps de fragmentation est donné par :

$$\tau_{frag} = \tau_{Ra} \frac{6(1 + 1.5 Oh^{0.74})}{\ln(We)^{1/4}} \quad (2.57)$$

Enfin, des travaux plus récents [41] tendent à montrer que le temps reste constant vis-à-vis du nombre de Weber, ce qui revient à négliger la dépendance en $\ln(We)^{1/4}$ et en $Oh^{0.74}$ dans la formule (2.57) :

$$\tau_{frag} \simeq 5 \tau_{Ra} \quad (2.58)$$

Sur la figure 2.11 est représentée l'évolution des différents temps en fonction du nombre de Weber. Le temps caractéristique de fragmentation est situé aux alentours de $5 \tau_{Ra}$ pour toutes les formules proposées.

2.1.5.3 Tailles et vitesses des fragments

La modélisation de la fragmentation nécessite la caractérisation des "particules filles" (tailles et vitesses). Plusieurs approches ont été développées pour calculer la taille des fragments. Le modèle le plus simple consiste à supposer que toutes les particules ont

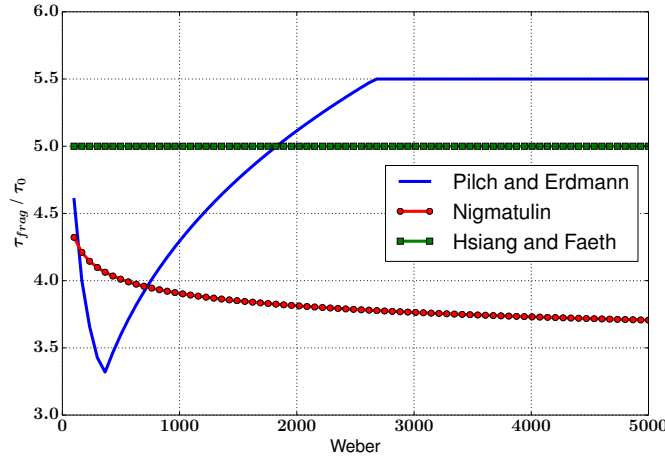


FIGURE 2.11 – Évolution du temps de fragmentation en fonction du nombre de Weber

la même taille après fragmentation et que leurs vitesses restent constantes durant le processus. Ainsi, le diamètre des particules liquides filles d_f est celui qui permet au nombre de Weber de passer en dessous du nombre de Weber critique We^c :

$$d_f = d_p \frac{We^c}{We} \quad (2.59)$$

Cette approche très simple a été améliorée par Pilch et Erdmann [61] pour prendre en compte la décroissance de la vitesse durant le processus de fragmentation. Néanmoins, malgré cette amélioration, la description *via* un unique diamètre ne permet pas de prendre en compte la dispersion en taille des particules. Pour cela, des modèles plus complexes ont été introduits en supposant la forme de la distribution en taille des particules filles. Les paramètres sont alors calibrés sur des observations expérimentales. Néanmoins, il n'y a pas unicité des fonctions dans la littérature : Pilch et Erdmann [61] proposent d'utiliser des log-normales, Hsiang et Faeth [41] font référence à une loi normale tandis que O'Rourke et Amsden [59] se basent sur une loi exponentielle.

Enfin, la caractérisation des particules filles nécessite la connaissance de leurs vitesses au moment où elles sont créées. Pour cela, la corrélation de Hsiang et Faeth [41] est la plus utilisée. Celle-ci suppose que la vitesse des particules produites ne dépend que de leur diamètre, de la vitesse de la particule liquide mère et de celle du fluide porteur :

$$\mathbf{v}_\diamond(d_\diamond, \mathbf{v}_*, d_*) = \mathbf{u}_f + \frac{\mathbf{v}_* - \mathbf{u}_f}{1 + 2.7 \left(\sqrt{\frac{\rho_f}{\rho_p}} \frac{d_*}{d} \right)^{2/3}} \quad (2.60)$$

où l'indice * fait référence à la particule mère et \diamond aux particules filles.

Cette rapide introduction sur le processus de fragmentation clôt la première partie de ce chapitre dédié à la modélisation des phénomènes physiques à l'échelle d'une particule. Dans la deuxième partie du chapitre, nous allons établir le système d'équations qui permet de décrire le brouillard, et ce, à partir des modèles que nous venons de présenter.

2.2 Équation de Williams-Boltzmann associée au brouillard

L'équation de Boltzmann, introduite dans les années 1870, permet de décrire le comportement cinétique des gaz hors équilibre. Il considère que le gaz est composé de N molécules assimilées à des sphères rigides de rayon r et de vitesse \mathbf{v} . Il introduit alors une densité de particules $f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$, telle que le nombre moyen de molécules à l'instant t dans la boule centrée en \mathbf{x} et de rayon $d\mathbf{x}$ ayant une vitesse comprise dans la boule centrée en \mathbf{v} et de rayon $d\mathbf{v}$:

$$dN = f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{x} d\mathbf{v} \quad (2.61)$$

L'équation qui régit le comportement de f est appelée l'équation de Boltzmann :

$$\partial_t f + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f = Q^{coll}(f) \quad (2.62)$$

où Q^{coll} est l'opérateur de collision entre les molécules. Williams, en 1958, a généralisé l'idée de Boltzmann pour modéliser un brouillard, en ajoutant les effets de variation de diamètre et d'énergie interne. Soient N particules, de vitesse \mathbf{v}_p , de diamètre d_p , d'énergie interne e_p et de déformation Ψ_p . En introduisant la densité en nombre de particules $f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}_p, d_p, e_p, \Psi_p)$ dans l'espace des phases $\mathbb{R}_{\mathbf{x}}^d \times \mathbb{R}_{\mathbf{v}}^d \times \mathbb{R}_e^+ \times \mathbb{R}_d^+ \times [0, 1]$, il est possible de calculer le nombre de particules dN comprises, à l'instant t , dans une boule centrée en \mathbf{x} de rayon $d\mathbf{x}$, ayant une vitesse comprise entre \mathbf{v} et $\mathbf{v}_p + d\mathbf{v}_p$, un diamètre compris entre d et $d + dd_p$, une énergie interne comprise entre e_p et $e_p + de_p$ et un coefficient de déformation Ψ_p compris entre Ψ_p et $\Psi_p + d\Psi_p$:

$$dN = f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}_p, d_p, e_p, \Psi_p) d\mathbf{x} d\mathbf{v}_p dd_p de_p d\Psi_p \quad (2.63)$$

La densité en nombre de particules f est solution de l'équation de Williams-Boltzmann :

$$\begin{aligned}
 \underbrace{\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}}(\mathbf{v}_{\mathbf{p}}f)}_{\text{Transport des}} &+ \underbrace{\nabla_{\mathbf{v}_{\mathbf{p}}}(\Phi_{\mathbf{v}}f)}_{\text{Forces agissant}} &+ \underbrace{\frac{\partial(\Phi_d f)}{\partial d_p}}_{\text{Variation du}} &+ \underbrace{\frac{\partial(\Phi_e f)}{\partial e_p}}_{\text{Chauffage de}} \\
 \text{particules} &\text{ sur les particules} &\text{ diamètre} &\text{ la particule} \\
 &+ \underbrace{\frac{\partial(\Phi_{\Psi} f)}{\partial \Psi_p}}_{\text{Effet de déformation}} &= \underbrace{Q^{frag}(f)}_{\text{Terme de}} \\
 &\text{de la particule} &\text{fragmentation}
 \end{aligned}
 \tag{2.64}$$

Le terme de collision n'est pas présent à la suite du calcul d'ordre de grandeur présenté dans la partie 2.1.4 page 59. Les termes $\Phi_{\mathbf{v}}$, Φ_d et Φ_e , représentent respectivement les forces qui s'appliquent aux particules, les effets de variation du diamètre (dilatation, évaporation, ...) et les effets de variation de l'énergie interne de la particule (chauffage, refroidissement). L'expression de ces termes est issue de l'analyse des phénomènes au niveau d'une particule, telle que décrite précédemment. Le terme Φ_{Ψ} représente les effets de variation de forme et Q^{frag} est l'opérateur de fragmentation. La variation de forme étant liée à la fragmentation, ces deux termes seront détaillés dans le chapitre 4 dédié à la modélisation de la fragmentation.

2.2.1 Expression des termes $\Phi_{\mathbf{v}}$, Φ_d et Φ_e

Expression de $\Phi_{\mathbf{v}}$ Le terme $\Phi_{\mathbf{v}}$ représente les forces qui agissent sur la particule et qui modifient sa vitesse :

$$\Phi_{\mathbf{v}} = \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{\mathbf{F}_{\mathbf{d}}}{m_p}
 \tag{2.65}$$

où m_p représente la masse d'une particule.

Dans la partie précédente, nous avons vu que la traînée est la force prédominante. Nous en rappelons l'expression :

$$\mathbf{F}_{\mathbf{d}} = \frac{\pi}{8} d_p^2 \rho_f C_D \|\mathbf{u}_{\mathbf{f}} - \mathbf{v}_{\mathbf{p}}\| (\mathbf{u}_{\mathbf{f}} - \mathbf{v}_{\mathbf{p}})
 \tag{2.66}$$

ce qui permet de calculer $\Phi_{\mathbf{v}}$:

$$\Phi_{\mathbf{v}} = \frac{3}{4} \frac{\rho_f}{\rho_p} \frac{C_D \|\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p\| (\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p)}{d_p} \quad (2.67)$$

L'expression des termes Φ_d et Φ_e dépend des modèles choisis pour la conduction thermique dans les particules.

Expression de Φ_d et Φ_e : hypothèse de conductivité nulle Sous l'hypothèse de conductivité nulle, la température de la particule ne varie pas et le flux thermique reçu par la particule sert à faire évaporer la partie superficielle. Le terme Φ_e est donc nul :

$$\Phi_e = 0 \quad (2.68)$$

L'expression du terme Φ_d s'obtient à partir de l'équation d'évolution de la masse de la particule. Dans ce modèle, le chauffage de la particule étant supposé nul, nous avons la relation suivante :

$$Q_f = -\dot{m} (h_p(T_{eb}) - h_p(T_p) + L_v(T_{eb})) \quad (2.69)$$

le terme $h_p(T_{eb}) - h_p(T_p)$ représente la variation d'enthalpie de la particule. En utilisant l'expression de Q_f de la partie précédente, nous obtenons :

$$\begin{aligned} \frac{dm_p}{dt} &= -\dot{m} \\ &= \begin{cases} \frac{-\pi d_p \lambda_f Nu^* (T_f - T_{eb})}{h_p(T_{eb}) - h_p(T_p) + L_v(T_{eb})} \frac{\ln(1 + B_T)}{B_T} & \text{si } T_f > T_{eb} \\ 0 & \text{si } T_f < T_{eb} \end{cases} \end{aligned} \quad (2.70)$$

Ce qui permet de calculer le terme Φ_d en se servant du fait que $m_p = \frac{\rho_p \pi d_p^3}{6}$:

$$\begin{aligned} \Phi_d &= \frac{dd_p}{dt} = \frac{2}{\rho_p \pi d_p^2} \frac{dm_p}{dt} \\ &= \begin{cases} \frac{-2 \lambda_f Nu^*}{\rho_p d_p} \frac{T_f - T_{eb}}{h_p(T_{eb}) - h_p(T_p) + L_v(T_{eb})} \frac{\ln(1 + B_T)}{B_T} & \text{si } T_f > T_{eb} \\ 0 & \text{si } T_f < T_{eb} \end{cases} \end{aligned} \quad (2.71)$$

avec :

$$B_T = \frac{c_{p,p} (T_f - T_{eb})}{L_v(T_{eb})} \quad (2.72)$$

Expression de Φ_d et Φ_e : hypothèse de conductivité infinie Dans ce modèle, la particule s'échauffe de manière uniforme jusqu'à atteindre sa température d'ébullition T_{eb} , puis s'évapore.

L'équation d'évolution de la température est la suivante :

$$m_p c_{p,p} \frac{dT_p}{dt} = \begin{cases} \pi d_p \lambda_f Nu^* (T_f - T_p) & \text{si } T_p < T_{eb} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.73)$$

D'où l'expression de Φ_e :

$$\begin{aligned} \Phi_e &= c_{p,p} \frac{dT_p}{dt} \\ &= \begin{cases} \frac{6 \lambda_f Nu^* (T_f - T_p)}{d_p^2} & \text{si } T_p < T_{eb} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \end{aligned} \quad (2.74)$$

L'expression de Φ_d est alors proche de celle obtenue précédemment :

$$\Phi_d = \begin{cases} \frac{-2 \lambda_f Nu^* T_f - T_{eb}}{\rho_p d_p} \frac{\ln(1 + B_T)}{L_v(T_{eb})} & \text{si } T_f > T_{eb} = T_p \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.75)$$

Remarque 1 : Les expressions ci-dessus sont valables pour des particules liquides. Pour des particules solides, il suffit de remplacer T_{eb} par T_{sub} (sublimation) et $L_v(T_{eb})$ par $L_{sub}(T_{sub})$.

Remarque 2 : Les grandeurs T_{eb} , T_{sub} , L_v , L_{sub} sont des fonctions de la pression.

2.2.2 Discrétisation dans l'espace des phases ($\mathbf{v}_p, d_p, e_p, \Psi_p$)

Le calcul explicite de f étant impossible, nous pouvons seulement l'approcher en utilisant la simulation numérique. Pour cela, il faut discrétiser les variables de f , que sont (à t fixé) les coordonnées d'espace, les composantes de vitesse, le diamètre, l'énergie interne et le facteur de déformation. Ces variables évoluent dans l'espace $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^+ \times [0,1]$, appelé espace des phases. Dans cette partie, nous présenterons la discrétisation en vitesse, diamètre, énergie interne et paramètre de déformation. La discrétisation spatio-temporelle sera abordée au chapitre suivant.

Méthode de discrétisation Lagrangienne La première approche, appelée approche Lagrangienne, consiste à suivre plusieurs particules numériques, chacune ayant sa propre vitesse v_i , diamètre d_i , énergie interne e_i et paramètre de déformation Ψ_i . La fonction f s'écrit alors comme une somme pondérée de mesures de Dirac :

$$f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}, d_p, e_p, \Psi_p) = \sum_{i=1}^N \omega_i \delta_{\mathbf{x}-\mathbf{x}_i(t)} \delta_{\mathbf{v}-\mathbf{v}_i(t)} \delta_{d-d_i(t)} \delta_{e-e_i(t)} \delta_{\Psi-\Psi_i(t)} \quad (2.76)$$

où ω_i représente le poids numérique de la particule i qui s'interprète physiquement comme le nombre moyen de particules réelles ayant les mêmes caractéristiques que la particule i .

La résolution de l'équation de Williams-Boltzmann (en l'absence de collision et de fragmentation) revient à calculer l'évaluation des paramètres $\mathbf{x}_i, \mathbf{v}_i, d_i, e_i$ et Ψ_i en résolvant le système d'équations :

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{x}_i}{dt} &= \mathbf{v}_i(t) & \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} &= \Phi_{\mathbf{v}_i}(t, \mathbf{x}_i, \mathbf{v}_i, d_i, e_i) \\ \frac{dd_i}{dt} &= \Phi_{d_i}(t, \mathbf{x}_i, \mathbf{v}_i, d_i, e_i) & \frac{de_i}{dt} &= \Phi_{e_i}(t, \mathbf{x}_i, \mathbf{v}_i, d_i, e_i) \\ \frac{d\Psi_i}{dt} &= \Phi_{\Psi_i}(t, \mathbf{x}_i, \mathbf{v}_i, d_i, e_i) \end{aligned} \quad (2.77)$$

Pour prendre en compte des phénomènes plus complexes tels que la fragmentation et la coalescence il faut utiliser des méthodes de type Monte-Carlo qui permettent de faire varier les poids numériques ω_i simultanément avec les autres variables attachées aux

particules numériques ([45, 89]). Lorsque le nombre de particules numériques est important, cette méthode s'avère très coûteuse, d'autant plus qu'elle est mal adaptée au calcul massivement parallèle.

Méthode de discrétisation Eulérienne La deuxième approche consiste à considérer uniquement des grandeurs moyennes telles que la concentration massique de particules, la vitesse moyenne, l'énergie moyenne et le facteur de déformation moyen. L'utilisation de ces quantités en lieu et place des quantités non moyennées entraîne une perte d'information. Ces méthodes sont donc moins précises mais sont par contre bien plus efficaces en terme de temps de calcul sur machine massivement parallèle. En effet, comme nous allons le voir, le nombre d'équations à résoudre ne dépend pas du nombre de particules et il est extrêmement simple de répartir uniformément la charge de calcul entre les processeurs. Pour cette raison, nous avons choisi la méthode Eulérienne.

Dérivation des équations du modèle Eulérien à partir de l'équation de Williams-Boltzmann Dans cette partie nous rappelons comment obtenir un modèle Eulérien multiclassés à partir de l'équation de Williams-Boltzmann. Plus de détails peuvent être trouvés dans la thèse de Dufour [16], nous renvoyons également aux publications de Mas-sot et Laurent [52].

Commençons par introduire les quantités moyennes suivantes :

Concentration numérique de particules :

$$n(t, \mathbf{x}, d_p) = \int_{\mathbf{v}_p, e_p, \Psi_p} f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}_p, d_p, e_p, \Psi_p) d\mathbf{v}_p \quad (2.78)$$

Vitesse moyenne des particules :

$$\bar{\mathbf{v}}(t, \mathbf{x}, d_p) = \frac{1}{n(t, \mathbf{x}, d_p)} \int_{\mathbf{v}_p, e_p, \Psi_p} \mathbf{v}_p f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}_p, d_p, e_p, \Psi_p) d\mathbf{v}_p de_p d\Psi_p \quad (2.79)$$

Energie interne moyenne des particules :

$$\bar{e}(t, \mathbf{x}, d_p) = \frac{1}{n(t, \mathbf{x}, d_p)} \int_{\mathbf{v}_p, e_p, \Psi_p} e_p f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}_p, d_p, e_p, \Psi_p) d\mathbf{v}_p de_p d\Psi_p \quad (2.80)$$

Déformation moyenne des particules :

$$\bar{\Psi}(t, \mathbf{x}, d_p) = \frac{1}{n(t, \mathbf{x}, d_p)} \int_{\mathbf{v}_p, e_p, \Psi_p} \Psi_p f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}_p, d_p, e_p, \Psi_p) d\mathbf{v}_p de_p d\Psi_p \quad (2.81)$$

En intégrant l'équation de Williams-Boltzmann sur les variables vitesses, énergie interne et facteur de déformation, nous obtenons la première équation suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} n + \nabla_{\mathbf{x}}(n \bar{\mathbf{v}}(t, \mathbf{x})) = Q^1 \quad (2.82)$$

où Q^1 désigne la quantité suivante :

$$Q^1 = \int_{\mathbf{v}_{\mathbf{p}}, e_p, \Psi_p} Q^{frag}(f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}_{\mathbf{p}}, d_p, e_p, \Psi_p)) d\mathbf{v}_{\mathbf{p}} de_p d\Psi_p \quad (2.83)$$

Cette équation correspond à une équation de conservation du nombre de particules. En multipliant l'équation (2.64) par la masse d'une particule m_p et en intégrant nous obtenons alors une équation de conservation de la masse :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (n m_p) + \nabla_{\mathbf{x}}(n m_p \bar{\mathbf{v}}) \\ + m_p \frac{\partial}{\partial d_p} \left(\int_{\mathbf{v}_{\mathbf{p}}, e_p, \Psi_p} f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}_{\mathbf{p}}, d_p, e_p, \Psi_p) \Phi_d d\mathbf{v}_{\mathbf{p}} de_p d\Psi_p \right) = Q^2 \end{aligned} \quad (2.84)$$

où Q^2 désigne la quantité suivante :

$$Q^2 = \int_{\mathbf{v}_{\mathbf{p}}, e_p, \Psi_p} m_p Q^{frag}(f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}_{\mathbf{p}}, d_p, e_p, \Psi_p)) d\mathbf{v}_{\mathbf{p}} de_p d\Psi_p \quad (2.85)$$

De même, en multipliant l'équation (2.64) par la quantité $m_p \mathbf{v}_{\mathbf{p}}$ et en intégrant nous obtenons une équation sur la quantité de mouvements des particules :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (n m_p \bar{\mathbf{v}}) + \nabla_{\mathbf{x}}(m_p \bar{\mathbf{v}} \otimes \bar{\mathbf{v}} + P) - \int_{\mathbf{v}_{\mathbf{p}}, e_p, \Psi_p} m_p f \Phi_{\mathbf{v}} d\mathbf{v}_{\mathbf{p}} de_p d\Psi_p \\ + m_p \frac{\partial}{\partial d_p} \left(\int_{\mathbf{v}_{\mathbf{p}}, e_p, \Psi_p} \mathbf{v}_{\mathbf{p}} f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}_{\mathbf{p}}, d_p, e_p, \Psi_p) \Phi_d d\mathbf{v}_{\mathbf{p}} de_p d\Psi_p \right) = Q^3 \end{aligned} \quad (2.86)$$

où Q^3 désigne la grandeur suivante :

$$Q^3 = \int_{\mathbf{v}_{\mathbf{p}}, e_p, \Psi_p} m_p \mathbf{v}_{\mathbf{p}} Q^{frag}(f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}_{\mathbf{p}}, d_p, e_p, \Psi_p)) d\mathbf{v}_{\mathbf{p}} de_p d\Psi_p \quad (2.87)$$

le terme P peut-être interprété comme un tenseur de contraintes cinétiques ([53]) :

$$P(t, \mathbf{x}, d_p) = \int_{\mathbf{v}_{\mathbf{p}}, e_p, \Psi_p} m_p f(t, \mathbf{x}, d_p, \mathbf{v}_{\mathbf{p}}, e_p) (\mathbf{v}_{\mathbf{p}} - \bar{\mathbf{v}}) \otimes (\mathbf{v}_{\mathbf{p}} - \bar{\mathbf{v}}) d\mathbf{v}_{\mathbf{p}} de_p d\Psi_p \quad (2.88)$$

De manière analogue, en multipliant l'équation (2.64) par la quantité $m_p e_p$ et en intégrant nous obtenons une équation de conservation de l'énergie interne des particules :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} n m_p \bar{e} + \nabla_{\mathbf{x}} (n m_p \bar{e} \bar{\mathbf{v}} + R) - \int_{\mathbf{v}_p, e_p, \Psi_p} m_p f \Phi_e d\mathbf{v}_p de_p d\Psi_p \\ + m_p \frac{\partial}{\partial d_p} \left(\int_{\mathbf{v}_p, e_p, \Psi_p} e_p f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}_p, d_p, e_p, \Psi_p) \Phi_d d\mathbf{v}_p de_p d\Psi_p \right) = Q^4 \end{aligned} \quad (2.89)$$

où Q^4 désigne la quantité suivante :

$$Q^4 = \int_{\mathbf{v}_p, e_p, \Psi_p} m_p e_p Q^{frag}(f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}_p, d_p, e_p, \Psi_p)) d\mathbf{v}_p de_p d\Psi_p \quad (2.90)$$

et R est défini par :

$$R(t, \mathbf{x}, d_p) = \int_{\mathbf{v}_p, e_p, \Psi_p} m_p f(t, \mathbf{x}, d_p, \mathbf{v}_p, e_p, \Psi_p) (\mathbf{v}_p - \bar{\mathbf{v}}) (e_p - \bar{e}) d\mathbf{v}_p de_p d\Psi_p \quad (2.91)$$

Enfin, en multipliant l'équation (2.64) par la quantité $m_p \Psi_p$ et en intégrant nous obtenons une équation sur la déformation des particules :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (n m_p \bar{\Psi}) + \nabla_{\mathbf{x}} (n m_p \bar{\Psi} \bar{\mathbf{v}} + S) - \int_{\mathbf{v}_p, e_p, \Psi_p} m_p f \Phi_{\Psi} d\mathbf{v}_p de_p d\Psi_p \\ + m_p \frac{\partial}{\partial d_p} \left(\int_{\mathbf{v}_p, e_p, \Psi_p} \Psi_p f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}_p, d_p, e_p, \Psi_p) \Phi_d d\mathbf{v}_p de_p d\Psi_p \right) = Q^5 \end{aligned} \quad (2.92)$$

où Q^5 désigne la quantité suivante :

$$Q^5 = \int_{\mathbf{v}_p, e_p, \Psi_p} m_p \Psi_p Q^{frag}(f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}_p, d_p, e_p, \Psi_p)) d\mathbf{v}_p de_p d\Psi_p \quad (2.93)$$

et S est défini par :

$$S(t, \mathbf{x}, d_p) = \int_{\mathbf{v}_p, e_p, \Psi_p} m_p f(t, \mathbf{x}, d_p, \mathbf{v}_p, e_p, \Psi_p) (\mathbf{v}_p - \bar{\mathbf{v}}) (\Psi_p - \bar{\Psi}) d\mathbf{v}_p de_p d\Psi_p \quad (2.94)$$

Le système d'équations à résoudre comporte sept inconnues $n(t, \mathbf{x})$, $\bar{\mathbf{v}}$, P , \bar{e}_p , $\bar{\Psi}_p$, R et S et seulement quatre équations indépendantes (les équations de nombre et de masse n'étant pas indépendantes). Il existe plusieurs techniques pour fermer ce système de manière approchée.

A ce stade pour fermer le système, l'hypothèse la plus simple et également la plus répandue dans la littérature sur la modélisation de brouillard consiste à poser :

$$f(t, \mathbf{x}, d_p, \mathbf{v}_p, e_p, \Psi_p) = n(t, \mathbf{x}, d_p) \delta_{\mathbf{v}_p - \bar{\mathbf{v}}(t, \mathbf{x}, d_p)} \delta_{e_p - \bar{e}(t, \mathbf{x}, d_p)} \delta_{\Psi_p - \bar{\Psi}(t, \mathbf{x}, d_p)} \quad (2.95)$$

C'est une hypothèse très forte puisqu'elle consiste à supposer que toutes les particules de même diamètre et localisées au même point de l'espace ont la même vitesse, la même énergie interne (même température) et la même forme. C'est une hypothèse acceptable si ces particules ont eu la même "histoire" et si elles possédaient initialement les mêmes caractéristiques. Pour les applications visées, c'est une approximation qui semble raisonnable.

Dans ce cas nous avons : $P = S = R = 0$, et le système à résoudre s'écrit finalement :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} n + \nabla_{\mathbf{x}}(n \bar{\mathbf{v}}(t, \mathbf{x})) = Q^1 \\ \frac{\partial}{\partial t} (n m_p) + \nabla_{\mathbf{x}}(n m_p \bar{\mathbf{v}}) + m_p \frac{\partial}{\partial d_p} (n \Phi_d) = Q^2 \\ \frac{\partial}{\partial t} (n m_p \bar{\mathbf{v}}) + \nabla_{\mathbf{x}}(m_p \bar{\mathbf{v}} \otimes \bar{\mathbf{v}}) - m_p n \Phi_{\mathbf{v}} + m_p \frac{\partial}{\partial d_p} (n \bar{\mathbf{v}} \Phi_d) = Q^3 \\ \frac{\partial}{\partial t} n m_p \bar{e} + \nabla_{\mathbf{x}}(n m_p \bar{e} \bar{\mathbf{v}}) - m_p n \Phi_e + m_p \frac{\partial}{\partial d_p} (n \bar{e} \Phi_d) = Q^4 \\ \frac{\partial}{\partial t} (n m_p \bar{\Psi}) + \nabla_{\mathbf{x}}(n m_p \bar{\Psi} \bar{\mathbf{v}}) - m_p n \Phi_{\Psi} + m_p \frac{\partial}{\partial d_p} (n \bar{\Psi} \Phi_d) = Q^5 \end{array} \right. \quad (2.96)$$

Discretisation de l'espace des phases en taille Il existe deux principales méthodes pour discrétiser l'espace des tailles : la méthode des classes et la méthode des sections. Comme représenté sur la figure 2.12, la méthode des classes consiste à échantillonner la fonction f ; et la méthode de sections à découper l'intervalle $[0, d_{max}]$ en intervalles plus petits appelés sections et à approcher la concentration $n(d)$ par une fonction continue par morceaux, de forme présumée (constante, affine, exponentielle...) sur chaque section. La méthode sectionnelle est précise et bien adaptée pour décrire une distribution en taille continue sur un intervalle connu à avance. Elle est cependant relativement coûteuse si la distribution en taille est étendue et si sa forme n'est pas connue a priori et évolue au cours du temps et d'une zone à l'autre de l'écoulement. Dans ce cas il est nécessaire, pour des raisons de précision numérique, d'utiliser un nombre très important de sections² [32, 51, 52, 82]. Dans notre cas, la fragmentation pouvant entraîner une diminution brutale du diamètre, le choix de la méthode aux sections ne semble pas adapté puisque les sections associées aux particules de plus grand diamètre se vident progressivement au cours du temps (cf. Fig. 2.12). Il nous a donc semblé préférable d'adopter une méthode de classes que nous allons maintenant décrire en détail.

2. à moins d'utiliser un maillage mobile dans l'espace des tailles mais la méthode est complexe à implémenter

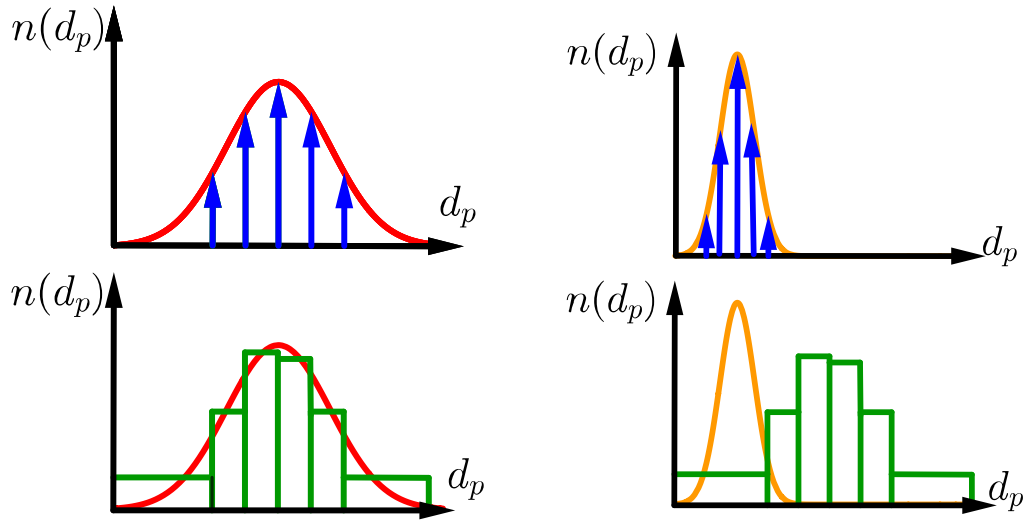


FIGURE 2.12 – Discretisation selon la méthode des classes (en haut) et la méthode aux sections (en bas)

2.2.3 Équations générales du système multi-classes

Par construction pour une méthode de classes, la fonction n s'écrit sous la forme :

$$n(t, x, d_p) = \sum_{i=1}^N n_i(t, \mathbf{x}) \delta_{d_p - d_i(t, \mathbf{x})} \quad (2.97)$$

Posons alors :

$$m_i = \frac{\rho_p \pi d_i^3}{6}, \quad \mathbf{v}_i = \bar{\mathbf{v}}(d_i), \quad e_i = \bar{e}(d_i), \quad \Psi_i = \bar{\Psi}(d_i) \quad (2.98)$$

où les variables t, x ont été omises pour alléger les notations. Nous déduisons alors du système des moments obtenu plus haut (cf. partie 2.96, page 76) le système suivant, valable pour la classe i (nous renvoyons à l'annexe 5.3 page 233 pour les détails de calcul) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} n_i + \nabla_{\mathbf{x}}(n_i \mathbf{v}_i) = Q_i^n \\ \frac{\partial}{\partial t} (n_i m_i) + \nabla_{\mathbf{x}}(n_i m_i \mathbf{v}_i) = Q_i^{nm} + n_i m'_p(d_i) \Phi_{d_i} \\ \frac{\partial}{\partial t} (n_i m_i \mathbf{v}_i) + \nabla_{\mathbf{x}}(n_i m_i \mathbf{v}_i \otimes \mathbf{v}_i) = \mathbf{Q}_i^{nmv} + n_i m'_p(d_i) \Phi_{d_i} \mathbf{v}_i + n_i m_i \Phi_{\mathbf{v}_i} \\ \frac{\partial}{\partial t} (n_i m_i e_i) + \nabla_{\mathbf{x}}(n_i m_i \mathbf{v}_i e_i) = Q_i^{nme} + n_i m'_p(d_i) \Phi_{d_i} e_i + n_i m_i \Phi_{e_i} \\ \frac{\partial}{\partial t} (n_i m_i \Psi_i) + \nabla_{\mathbf{x}}(n_i m_i \mathbf{v}_i \Psi_i) = Q_i^{nm\Psi} + n_i m'_p(d_i) \Phi_{d_i} \Psi_i + n_i m_i \Phi_{\Psi_i} \end{array} \right. \quad (2.99)$$

Les termes Q_i^n , Q_i^{nm} , \mathbf{Q}_i^{nmv} , Q_i^{nme} et $Q_i^{nm\Psi}$ seront détaillés dans le chapitre 4 consacré à la fragmentation. Le facteur $m'_p(d_i)$ permet de prendre en compte le rapport entre la dérivation selon la masse et celle selon le diamètre :

$$m'_p(d_i) = \frac{d}{dd_i} m_i(d_i) = \frac{\rho_p \pi d_i^2}{2} \quad (2.100)$$

Nous tenons ici à rappeler que n_i représente le nombre de particules par unité de volume et m_i la masse d'une particule de la classe i . Ainsi, la quantité $n_i m_i$ correspond à la masse de particules de la classe i par unité de volume. Comme nous pouvons le constater le nombre d'équations à résoudre n'est pas directement relié au nombre de particules mais au nombre de classes utilisées pour discrétiser f .

2.2.3.1 Traitement de l'interaction particule-paroi dans le cadre du modèle multi-classes

Comme nous l'avons vu, l'interaction avec la paroi est prise en compte en utilisant un modèle de réémission. Dans le cas particulier du modèle multi-classes, cela revient à dupliquer dès l'initialisation du calcul la liste des classes, pour prendre en compte les particules qui seront émises depuis la paroi à la suite de l'impact de particules appartenant aux classes dites "primaires". Ainsi, si nous souhaitons modéliser N classes de particules, l'initialisation sera faite avec $2N$ classes, les N premières étant associées aux particules incidentes et les N suivantes aux particules réémises. Lorsqu'une classe atteint la paroi, les paramètres de la classe correspondant aux particules réémises sont initialisés grâce aux paramètres de la classe incidente, selon les équations (2.39) de la page 59.

2.2.3.2 Traitement des termes de rétroaction dans le cadre du modèle multi-classes

Enfin, pour conclure sur l'écriture du système d'équations dans le cadre du modèle multi-classes choisi, nous abordons ici la prise en compte de la rétroaction des particules sur le fluide. L'interaction entre le fluide et les particules se fait via trois échanges :

- un échange de masse dû à l'évaporation,
- un échange de quantité de mouvement dû à la force de traînée,
- un échange d'énergie dû aux transferts thermiques et au travail de la force de traînée.

Pour modéliser l'effet des particules sur le fluide nous introduisons un terme source dans les équations qui régissent le comportement du fluide : en notant \mathbf{U}_f le vecteur

$(\rho_f, \rho_f \mathbf{u}_f, \rho_f E_f)^t$ les variables conservatives du fluide (la densité, la quantité de mouvement et l'énergie totale du fluide), nous pouvons écrire l'équation du fluide sous la forme suivante :

$$\frac{\partial \mathbf{U}_f}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}}(\mathbf{U}_f, \nabla \mathbf{U}_f) = \mathbf{S}^{\text{ext}} + \mathbf{S}^{\text{chim}} + \mathbf{S}^{\text{part}} \quad (2.101)$$

Les vecteurs \mathbf{S}^{ext} et \mathbf{S}^{chim} correspondent aux termes sources dus aux forces extérieures et aux réactions chimiques, comme nous l'avons vu au chapitre précédent. Le vecteur \mathbf{S}^{part} correspond aux termes sources dus aux particules, il s'exprime alors sous la forme d'une somme de toutes les contributions de chaque classe :

$$\mathbf{S}^{\text{part}} = - \sum_{i=1}^N \left(\begin{array}{l} Q_i^n \\ Q_i^{nm} + n_i m'_p(d_i) \Phi_{d_i} \\ \mathbf{Q}_i^{\text{nmv}} + n_i m'_p(d_i) \Phi_{d_i} \mathbf{v}_i + n_i m_i \Phi_{\mathbf{v}_i} \\ Q_i^{nme} + n_i m'_p(d_i) \Phi_{d_i} e_i + n_i m_i \Phi_{e_i} \\ Q_i^{nm\Psi} + n_i m'_p(d_i) \Phi_{d_i} \Psi_i + n_i m_i \Phi_{\Psi_i} \end{array} \right) \left. \vphantom{\sum_{i=1}^N} \right\} \begin{array}{l} \text{Second membre} \\ \text{du système} \\ \text{lié à la} \\ \text{phase particulière} \end{array}$$

$$- \sum_{i=1}^N \left(\begin{array}{l} 0 \\ 0 \\ \mathbf{0} \\ n_i m_i \Phi_{\mathbf{v}_i} \cdot \mathbf{v}_i + n_i m'_p(d_i) \Phi_{d_i} \frac{\|\mathbf{v}_i\|^2}{2} \\ 0 \end{array} \right) \left. \vphantom{\sum_{i=1}^N} \right\} \begin{array}{l} \text{Second membre} \\ \text{lié au choix de} \\ \text{travailler en} \\ \text{énergie interne} \end{array}$$

Puissance volumique Energie cinétique
de la force de traînée évaporée

(2.102)

Notons que le vecteur \mathbf{S}^{part} n'est pas l'opposé du second membre des équations des particules. Cela vient du choix de travailler avec une équation sur l'énergie interne des particules et non l'énergie totale, la puissance volumique de la force de traînée et l'énergie cinétique des particules qui se sont évaporées ne sont alors pas prise en compte dans le bilan d'énergie. Il convient donc de le rajouter au moment de calculer le terme source transmis au fluide.

2.3 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons établi le système d'équations qui permet de modéliser le brouillard. Nous avons procédé en deux étapes. Tout d'abord, nous avons décrit les phénomènes physiques agissant au niveau d'une particule. Ensuite, nous avons établi l'équation cinétique qui permet de modéliser le brouillard. A la suite de cela, nous avons effectué une semi-discrétisation dans l'espace des phases en vitesse, diamètre, énergie interne et paramètre de déformation, laissant ainsi la discrétisation spatio-temporelle pour le chapitre suivant.

Chapitre 3

Discrétisation numérique du modèle et tests académiques de validation

Sommaire

Nomenclature du chapitre 3	82
3.1 Discrétisation du système	84
3.1.1 Discrétisation spatiale	84
3.1.2 Discrétisation temporelle	92
3.1.3 Quelques propriétés mathématiques du schéma de discrétisation utilisé pour la phase particulière	96
3.1.4 Traitement numérique de la configuration axisymétrique	99
3.1.5 Traitement numérique des conditions aux limites	101
3.1.6 Traitement numérique des termes de rétroaction	103
3.2 Résultats des tests de validation sur des configurations aca- démiques	110
3.2.1 Cas d'épreuve #1 : Validation du traitement numérique du transport et des phénomènes thermiques	110
3.2.2 Cas d'épreuve #2 : Validation du traitement numérique du sys- tème complet	117
3.2.3 Validation de l'implémentation numérique des conditions aux limites d'interaction particules-paroi	132

Nomenclature du chapitre 3

Lettres romanes		Unité
E_f	Energie totale par unité de masse du fluide	$m^2.s^{-2}$
T_f	Température du fluide	K
\mathbf{u}_f	Vitesse du fluide	$m.s^{-1}$
$c_{p,p}$	Capacité thermique massique à pression constante	$m.s^{-2}.K^{-1}$
d	Diamètre de la (des) particule(s)	m
e	Energie interne par unité de masse de la (des) particule(s)	$m^2.s^{-2}$
L_v	Chaleur latente de la (des) particule(s)	$m^2.s^{-2}$
m	Masse d'une particule	kg
n	Nombre de particules par unité de volume	m^{-3}
T	Température de la (des) particule(s)	K
\mathbf{v}	Vitesse de la (des) particule(s)	$m.s^{-1}$
Lettres grecques		
λ_f	Conductivité thermique du fluide	$kg.m^{-1}.s^{-3}.K^{-1}$
ρ_f	Densité du fluide	$kg.m^{-3}$
ρ_p	Densité de la (des) particule(s)	$kg.m^{-3}$
τ_{axi}	Temps caractéristique des effets dus à l'axisymétrie	s
τ_{ch}	Temps caractéristique de chauffage	s
τ_{dy}	Temps caractéristique des effets dynamiques	s
τ_{ev}	Temps caractéristique d'évaporation	s

Nombres sans dimension

B_T Nombre de Spalting

Ψ Facteur de forme de la (des) particule(s)

Le chapitre précédent nous a permis d'introduire le système d'équations suivant pour modéliser le mélange {fluide + particules} :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U}_f + \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{G}(\mathbf{U}_f, \nabla \mathbf{U}_f) = \mathbf{S}^{\text{ext}} + \mathbf{S}^{\text{chim}} + \widetilde{\mathbf{S}^{\text{part}}} \\ \frac{\partial}{\partial t} (n_i m_i) \mathbf{V}_i + \nabla_{\mathbf{x}} (n_i m_i \mathbf{V}_i \mathbf{v}_i) = \mathbf{S}^{\text{part}} \end{cases} \quad (3.1)$$

où \mathbf{U}_f représente le vecteur des variables conservatives du fluide et \mathbf{V}_i le vecteur des variables associées aux particules de la classe i (voir le chapitre précédent pour plus de détails) :

$$\mathbf{U}_f = (\rho_f, \rho_f \mathbf{u}_f, \rho_f E_f)^t \quad \mathbf{V}_i = (n_i/m_i, 1, \mathbf{v}_i, e_i, \Psi_i)^t \quad (3.2)$$

Les termes sources \mathbf{S}^{ext} et \mathbf{S}^{chim} représentent respectivement les forces extérieures volumiques appliquées au fluide et les réactions chimiques. Les termes \mathbf{S}^{part} et $\widetilde{\mathbf{S}^{\text{part}}}$ correspondent aux échanges entre les deux phases. Ils ne sont pas égaux car $\widetilde{\mathbf{S}^{\text{part}}}$ prend en compte le travail de la force de traînée des particules.

Nous sommes ainsi ramenés à la résolution d'un système d'équations aux dérivées partielles en temps et en espace pour lequel il reste à choisir une méthode de discrétisation. C'est l'objet de la première partie de ce chapitre. Nous aborderons tout d'abord la discrétisation spatiale, puis la discrétisation temporelle.

3.1 Discrétisation du système

3.1.1 Discrétisation spatiale

3.1.1.1 Rappels généraux sur la méthode des volumes finis

La méthode des volumes finis a été choisie pour discrétiser spatialement les équations. Dans le cas du code du CEA, celle-ci est appliquée sur des maillages structurés (cf. Fig. 3.1) :

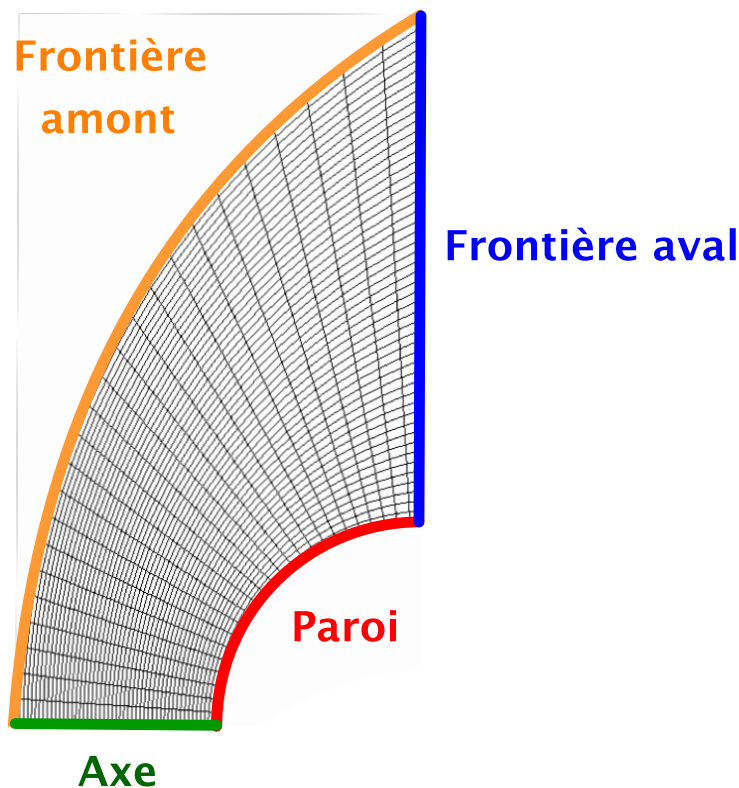
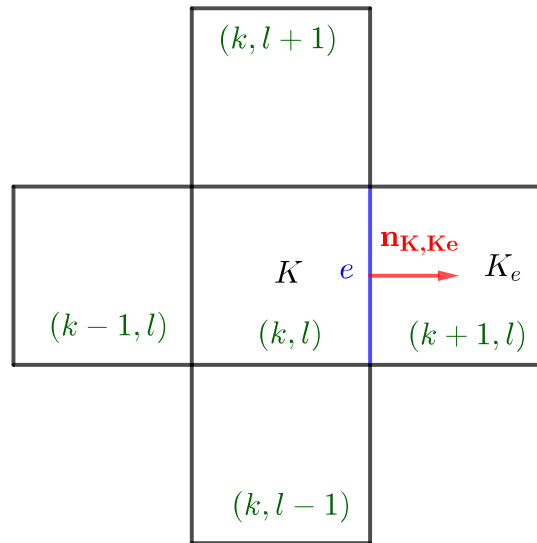


FIGURE 3.1 – Maillage structuré utilisé dans le cadre de l'étude

Nous effectuerons quelques rappels sur la méthode des volumes finis et nous renvoyons à [3, 85, 88] pour de plus amples détails, en particulier sur le traitement des équations de Navier-Stokes.

Soit \mathcal{Q} un maillage structuré tel que présenté sur la figure précédente, K une des mailles de \mathcal{Q} et ∂K le contour de cette maille. Notons $\mathbf{n}_{K,Ke}$ le vecteur unitaire sortant dirigé de la maille K vers la maille Ke (cf. Fig. 3.2)


 FIGURE 3.2 – Description de la maille K du maillage \mathcal{Q}

Considérons maintenant un système de loi de conservation écrit sous la forme générale :

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \mathbf{S} \quad (3.3)$$

En intégrant cette équation sur la maille K et en notant $|K|$ le volume (ou l'aire) de la maille, nous obtenons :

$$|K| \frac{\partial}{\partial t} \bar{\mathbf{U}} + \int_K \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{F}(\mathbf{U}) = |K| \bar{\mathbf{S}} \quad (3.4)$$

avec par définition :

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{U}} &= \frac{1}{|K|} \int_K \mathbf{U}(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} \\ \bar{\mathbf{S}} &= \frac{1}{|K|} \int_K \mathbf{S}(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} \end{aligned} \quad (3.5)$$

En utilisant le théorème de Green-Ostrogradski, le calcul de l'intégrale sur le volume se ramène à celui du flux qui traverse sa frontière :

$$\int_K \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \oint_{\partial K} \mathbf{F}(\mathbf{U}) \cdot \mathbf{n} \quad (3.6)$$

où \mathbf{n} désigne le vecteur unitaire sortant de ∂K . Le calcul du flux est effectué en sommant sur toutes les faces de la maille K :

$$\oint_{\partial K} \mathbf{F}(\mathbf{U}) \cdot \mathbf{n} = \sum_{e \in \partial K} |e| \mathbf{F}_{\mathbf{K}, \mathbf{K}_e} \quad (3.7)$$

avec $|e|$ l'aire (ou la longueur) de l'interface entre les mailles K et Ke . $\mathbf{F}_{\mathbf{K},\mathbf{K}e}$ est appelé flux numérique entre les mailles K et Ke . La précision, stabilité et la convergence du schéma numérique dépendent du choix effectué pour calculer ce flux numérique. En effet, dans les schémas classiques, nous avons accès à la valeur moyenne de la solution dans chaque maille et non à celle de l'interface. Il faut donc l'approcher. Le choix de cette approximation influence l'ordre, la convergence et la stabilité du schéma global.

Afin d'illustrer ce phénomène, plaçons-nous dans le cas d'une équation scalaire 1D d'inconnue u :

$$\frac{\partial}{\partial t}u + \partial_x(f(u)) = 0 \quad (3.8)$$

Soit un maillage \mathcal{L} 1D, soit k une maille de ce maillage. Notons $k + 1/2$ l'indice de frontière entre la maille k et la maille $k + 1$. De même, notons $k - 1/2$ l'indice de frontière entre les mailles $k - 1$ et k (cf. Fig. 3.3). Notons alors $f_{k+1/2}$ le flux associé à l'interface $k + 1/2$.

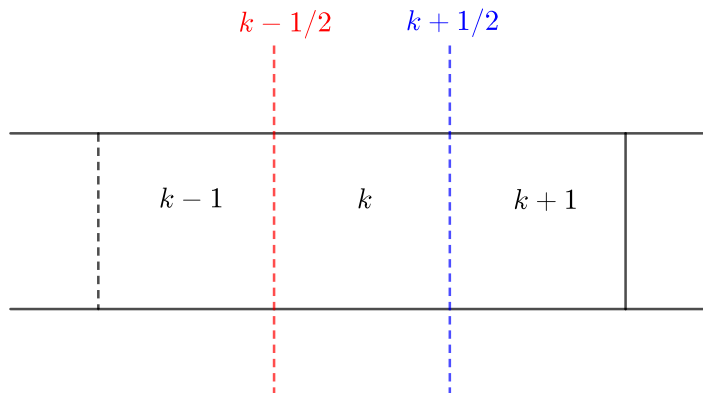


FIGURE 3.3 – Discrétisation de l'espace en 1D

Le calcul exact du flux n'est pas possible car il nécessite la connaissance de u au niveau de l'interface $k + 1/2$:

$$f_{k+1/2} = f(u_{k+1/2}) \quad (3.9)$$

Le schéma centré permet d'approximer le flux $f_{k+1/2}$ en effectuant la moyenne entre les valeurs aux mailles k et $k + 1$:

$$f_{k+1/2} = \frac{f(u_k) + f(u_{k+1})}{2} \quad (3.10)$$

Combiné à une discrétisation temporelle explicite, ce flux numérique correspond à un schéma inconditionnellement instable. Pour pallier ce problème, nous pouvons introduire un terme dit de "dissipation artificielle", comme dans le cas du schéma de Jameson [46].

Le schéma Upwind ne nécessite pas la mise en place explicite de viscosité artificielle. Pour comprendre le principe de ce schéma, revenons au cas d'une équation de transport à coefficient constant a :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (3.11)$$

L'idée est d'analyser la provenance de l'information, donnée par le signe de a . Si l'information se propage de la maille k à la maille $k + 1$, le flux sera calculé à partir des valeurs de la maille k . Inversement, si l'information se déplace de la maille $k + 1$ à la maille k , il faut utiliser les valeurs de la maille $k + 1$:

$$f_{k+1/2} = \begin{cases} a u_k & \text{si } a > 0 \\ a u_{k+1} & \text{si } a < 0 \end{cases} \quad (3.12)$$

Il est possible d'écrire l'expression précédente sous une forme plus compacte :

$$f_{k+1/2} = \frac{1}{2} (a u_k + a u_{k+1}) - \frac{1}{2} |a| (u_{k+1} - u_k) \quad (3.13)$$

Remarque : le terme $-\frac{1}{2} |a| (u_{k+1} - u_k)$ de l'équation (3.13) peut s'interpréter comme un ajout de viscosité artificielle $\left(\mu_{\Delta x} = \frac{1}{2} |a| \Delta x\right)$.

Ces deux méthodes sont simples à implémenter mais ne sont pas suffisamment précises pour la plupart des applications. Pour pallier ce problème, deux méthodes existent : la méthode dite "des limiteurs de flux" qui consiste à corriger le flux numérique, et la méthode dite "des limiteurs de pente" qui consiste à corriger les valeurs d'entrée de la fonction calculant le flux. Nous détaillerons la méthode MUSCL (Monotonic Upwind Scheme for Conservation Laws), introduite par Van Leer [87] qui est une méthode de limiteur de pente. L'idée consiste à calculer deux états intermédiaires $u_{k+1/2}^+$ et $u_{k+1/2}^-$ qui serviront ensuite pour le calcul du flux $f_{k+1/2}$:

$$f_{k+1/2} = \begin{cases} f(u_k, u_{k+1}) & \text{à l'ordre 1} \\ f(u_{k+1/2}^+, u_{k+1/2}^-) & \text{à l'ordre 2} \end{cases} \quad (3.14)$$

Pour cela, au lieu de considérer que la valeur de u est constante dans chaque maille, elle varie de manière linéaire. Il est alors possible de calculer une première approximation de $u_{k+1/2}$ selon une interpolation linéaire à partir des mailles $k - 1$ et k , notée $u_{k+1/2}^-$ et une seconde à partir des mailles $k + 1$ et $k + 2$, notée $u_{k+1/2}^+$ (cf. Fig. 3.4) :

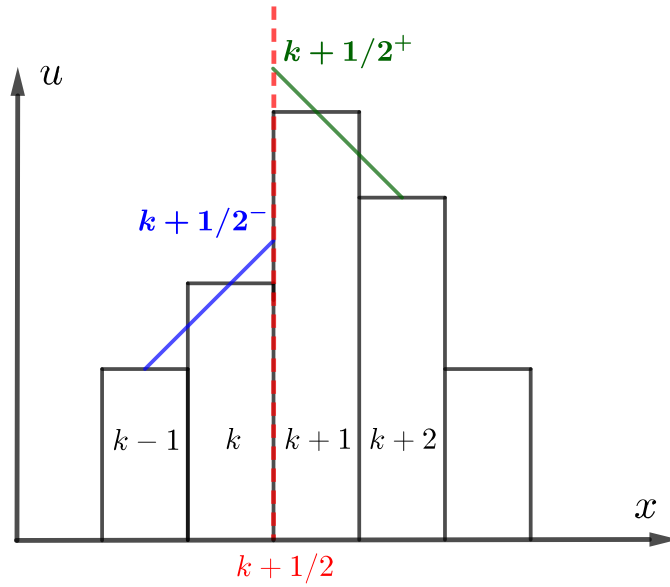


FIGURE 3.4 – Principe l'interpolation de la méthode MUSCL

$$\begin{aligned}
 u_{k+1/2}^- &= u_k + \frac{1}{2}(u_k - u_{k-1}) \\
 u_{k+1/2}^+ &= u_{k+1} - \frac{1}{2}(u_{k+2} - u_{k+1})
 \end{aligned}
 \tag{3.15}$$

Pour éviter les oscillations du schéma, Van Leer [87] introduit un limiteur $\phi(r)$ où r représente le rapport des pentes successives de u dans deux cellules adjacentes :

$$r_k = \frac{u_k - u_{k-1}}{u_{k+1} - u_k} \quad r_{k+1} = \frac{u_{k+1} - u_k}{u_{k+2} - u_{k+1}}
 \tag{3.16}$$

Le schéma devient alors :

$$\begin{aligned}
 u_{k+1/2}^- &= u_k + \phi(r_k) \frac{1}{2}(u_k - u_{k-1}) \\
 u_{k+1/2}^+ &= u_{k+1} - \phi(r_{k+1}) \frac{1}{2}(u_{k+2} - u_{k+1})
 \end{aligned}
 \tag{3.17}$$

Il existe de nombreux limiteurs de pente. Le choix d'un limiteur dépend du compromis entre précision et robustesse : le plus robuste (donc le moins précis) est le limiteur minmod [70] et le plus précis (donc le moins robuste) est le limiteur superbee [70] :

$$\begin{aligned}
 \phi(r) &= \max(0, \min(1, r)) && \text{Minmod} \\
 \phi(r) &= \max(0, \min(1, 2r), \min(2, r)) && \text{Superbee}
 \end{aligned}
 \tag{3.18}$$

Après cette introduction générale sur les volumes finis, nous allons aborder plus particulièrement les schémas numériques utilisés pour la résolution des équations d'Euler (et par extension celles de Navier-Stokes) dans le cadre de la thèse.

3.1.1.2 Application au cas du système fluide-particules

Traitement de la phase fluide Considérons les équations d'Euler 1D. Comme nous ne traiterons ici que la partie fluide, nous omettrons, pour plus de lisibilité, les indices f .

Le problème de Riemann associé aux équations d'Euler s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \mathbf{0} \quad (3.19)$$

associé à la condition initiale :

$$\mathbf{U}(x,0) = \begin{cases} \mathbf{U}_k & \text{si } x < 0 \\ \mathbf{U}_{k+1} & \text{si } x > 0 \end{cases} \quad (3.20)$$

où :

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho E \end{pmatrix} \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho u H \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

et où $H = E + p/\rho$ désigne l'enthalpie totale du fluide.

La plupart des schémas numériques sont basés sur l'approximation de la solution du problème de Riemann. Nous pouvons par exemple citer les schémas HLL [36] et leurs extensions. Un autre schéma, appelé schéma de Roe [69], consiste à remplacer le problème exact de Riemann par un problème approché. C'est le schéma historiquement utilisé pour résoudre les équations de la mécanique des fluides.

L'idée du schéma de Roe est de linéariser le système en le remplaçant par :

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U} + \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{U}_k, \mathbf{U}_{k+1}) \partial_x \mathbf{U} = \mathbf{0} \quad (3.22)$$

où $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{U}_k, \mathbf{U}_{k+1})$ vérifie les propriétés suivantes :

- elle est diagonalisable avec des valeurs propres réelles
- $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{U}, \mathbf{U}) = \mathbf{A}(\mathbf{U})$ avec $\mathbf{A}(\mathbf{U}) = \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{U})$
- $\mathbf{F}_{k+1} - \mathbf{F}_k = \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{U}_k, \mathbf{U}_{k+1})(\mathbf{U}_{k+1} - \mathbf{U}_k)$

Le flux $\mathbf{F}_{k+1/2}$ s'écrit alors :

$$\mathbf{F}_{k+1/2} = \frac{1}{2} \left(\mathbf{F}_k + \mathbf{F}_{k+1} - \left| \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{U}_k, \mathbf{U}_{k+1}) \right| (\mathbf{U}_{k+1} - \mathbf{U}_k) \right) \quad (3.23)$$

Un des intérêts de la méthode, dans le cas des équations d'Euler, réside dans le fait que la matrice $\tilde{\mathbf{A}}$ se calcule facilement en introduisant le vecteur $\widetilde{\mathbf{U}}_{\mathbf{k}+1/2}$ des états intermédiaires :

$$\begin{aligned} a &= \sqrt{\frac{\rho_{k+1}}{\rho_k}} \\ \tilde{\rho} &= a \rho_k = \sqrt{\rho_k \rho_{k+1}} \\ \tilde{\mathbf{u}} &= \frac{\mathbf{u}_k + a \mathbf{u}_{k+1}}{1 + a} \\ \tilde{H} &= \frac{H_k + a H_{k+1}}{1 + a} \end{aligned} \quad (3.24)$$

La matrice de Roe est alors définie par :

$$\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{U}_k, \mathbf{U}_{k+1}) = A(\widetilde{\mathbf{U}}_{\mathbf{k}+1/2}) \quad (3.25)$$

Le schéma de Roe peut générer des solutions non entropiques lorsque les valeurs propres associées aux ondes acoustiques s'annulent (point sonique). Harten [35] a proposé une correction de celui-ci : chaque valeur propre acoustique λ_j de la matrice $\tilde{\mathbf{A}}$ est remplacée par la correction suivante :

$$|\lambda_j^{\text{Harten}}| = \begin{cases} \frac{\lambda_j^2 + \delta^2}{2} & \text{si } |\lambda_j| < \delta \\ |\lambda_j| & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.26)$$

Le paramètre δ est ajustable et doit être le plus petit possible. L'expression du flux est la suivante :

$$\mathbf{F}_{\mathbf{k}+1/2} = \frac{1}{2} \left(\mathbf{F}_k + \mathbf{F}_{k+1} - \tilde{\mathbf{R}} \boldsymbol{\Lambda}^{\text{Harten}} \tilde{\mathbf{R}}^{-1} (\mathbf{U}_{k+1} - \mathbf{U}_k) \right) \quad (3.27)$$

Nous ne décrivons pas les autres schémas numériques et nous renvoyons à [3, 85, 88] pour plus de détails.

Traitement numérique de la phase particulière Considérons le système d'équations pour une classe de particule i . Afin de ne pas surcharger les notations, nous ne noterons pas l'indice i lié à la classe des particules :

$$\frac{\partial}{\partial t} n m \mathbf{V} + \nabla_{\mathbf{x}}(n m \mathbf{V} \mathbf{v}) = \mathbf{S}^{\text{part}} \quad (3.28)$$

avec $\mathbf{V} = (1/m, 1, \mathbf{v}, e, \Psi)^t$

Le système d'équations des particules peut s'interpréter comme un système d'équations de transport de la quantité $n m \mathbf{V}$ à vitesse \mathbf{v} , auquel il convient d'ajouter les termes sources :

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t} n m \mathbf{V} + \nabla_{\mathbf{x}}(n m \mathbf{V} \mathbf{v})}_{\text{Équation de transport}} = \underbrace{\mathbf{S}^{\text{part}}}_{\text{Termes sources}} \quad (3.29)$$

Plaçons-nous sur la maille k du maillage \mathcal{L} avec les notations définies par la figure 3.3. La quantité transportée étant $n m \mathbf{V}$, nous avons décidé d'utiliser une vitesse interfaciale $\mathbf{v}_{\mathbf{k}+1/2}$, calculée par le barycentre des flux de masse des mailles k et $k+1$:

$$v_{\mathbf{k}+1/2} = \frac{n_k m_k (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{n}_{\mathbf{k}+1/2}) + n_{k+1} m_{k+1} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}+1} \cdot \mathbf{n}_{\mathbf{k}+1/2})}{n_k m_k + n_{k+1} m_{k+1}} \quad (3.30)$$

La discrétisation de l'équation de masse est alors la suivante :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(n_k m_k) &= \frac{1}{\Delta x_k} v_{k-1/2}^+ n_{k-1}^n m_{k-1}^n + \frac{1}{\Delta x_k} v_{k+1/2}^- n_{k+1}^n m_{k+1}^n \\ &\quad - \frac{1}{\Delta x_k} v_{k-1/2}^- n_k^n m_k^n - \frac{1}{\Delta x_k} v_{k+1/2}^+ n_k^n m_k^n \end{aligned} \quad (3.31)$$

où $v_{k+1/2}^-$ et $v_{k+1/2}^+$ sont respectivement la partie négative et positive de $v_{k+1/2}$:

$$v_{k+1/2}^+ = \frac{|v_{k+1/2}| + v_{k+1/2}}{2} \quad (3.32)$$

$$v_{k+1/2}^- = \frac{|v_{k+1/2}| - v_{k+1/2}}{2} \quad (3.33)$$

En utilisant un schéma Upwind, l'expression du flux numérique pour le système (3.29) s'écrit :

$$\varphi_{\mathbf{k}+1/2} = \mathbf{V}_{\mathbf{k}} v_{k+1/2}^+ - \mathbf{V}_{\mathbf{k}+1} v_{k+1/2}^- \quad (3.34)$$

L'utilisation de cette vitesse interfaciale et de cette expression du flux permet d'assurer la positivité de la concentration massique $n m$ ainsi que la préservation du principe du maximum sur la masse, la vitesse, l'énergie et le facteur de déformation sous condition CFL. Cela sera démontré dans la partie suivante (partie 3.1.3, page 96).

Il est important de noter que le schéma (1D) présenté se généralise sur un maillage quelconque en dimension $d > 1$. Il s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} n_{k,l} m_{k,l} \mathbf{V}_{\mathbf{k},l} + \frac{1}{\Delta X} (\varphi_{\mathbf{k}+1/2,l} - \varphi_{\mathbf{k}-1/2,l}) \\ + \frac{1}{\Delta Y} (\varphi_{\mathbf{k},l+1/2} - \varphi_{\mathbf{k},l-1/2}) = \mathbf{S}_{i,j}^{\text{part}} \end{aligned} \quad (3.35)$$

avec :

$$\varphi_{\mathbf{k}+1/2} = v_{k+1/2}^+ \begin{pmatrix} n_k \\ n_k m_k \\ n_k m_k v_k^x \\ n_k m_k v_k^y \\ n_k m_k e_k \\ n_k m_k \Psi_k \end{pmatrix} - v_{k+1/2}^- \begin{pmatrix} n_{k+1} \\ n_{k+1} m_{k+1} \\ n_{k+1} m_{k+1} v_{k+1}^x \\ n_{k+1} m_{k+1} v_{k+1}^y \\ n_{k+1} m_{k+1} e_{k+1} \\ n_{k+1} m_{k+1} \Psi_{k+1} \end{pmatrix} \quad (3.36)$$

Le schéma d'ordre 1 étant trop diffusif, nous avons utilisé la méthode MUSCL décrite précédemment avec le limiteur minmod. Nous montrerons dans la partie dédiée aux tests de validation élémentaire l'intérêt pratique du passage à l'ordre 2.

3.1.2 Discrétisation temporelle

3.1.2.1 Rappels généraux sur la méthode de discrétisation temporelle des systèmes différentiels

Avant de décrire les méthodes utilisées pour la discrétisation temporelle des équations de chaque phase, nous commençons par quelques rappels. Comme les conditions amont du calcul varient lentement par rapport au temps caractéristique de l'écoulement, nous chercherons, comme il est classiquement fait en aérodynamique, un état stationnaire (*ie* $t \rightarrow \infty$). Considérons un système général de lois de conservation :

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U}_{\mathbf{K}} + \frac{1}{|K|} \sum_{e \in \partial K} |e| \mathbf{F}_{\mathbf{K},\mathbf{K}e}(\mathbf{U}_{\mathbf{K}}) = \mathbf{S}(\mathbf{U}_{\mathbf{K}}) \quad (3.37)$$

L'approche la plus simple pour discrétiser temporellement cette équation consiste à utiliser une méthode d'Euler explicite :

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U}_{\mathbf{K}} \simeq \frac{U_{\mathbf{K}}^{n+1} - U_{\mathbf{K}}^n}{t^{n+1} - t^n} \quad (3.38)$$

L'équation devient alors la suivante :

$$\frac{\mathbf{U}_{\mathbf{K}}^{n+1} - \mathbf{U}_{\mathbf{K}}^n}{t^{n+1} - t^n} + \frac{1}{|K|} \sum_{e \in \partial K} |e| \mathbf{F}_{\mathbf{K}, \mathbf{K}e}(\mathbf{U}_{\mathbf{K}}^n) = \mathbf{S}(\mathbf{U}_{\mathbf{K}}^n) \quad (3.39)$$

Cette méthode est très simple à implémenter mais n'est stable que sous une condition de limitation du pas de temps, dite condition CFL, liée à l'équation considérée [14]. Dans le cas de l'équation linéaire de transport 1D, celle-ci s'exprime sous la forme suivante :

$$\frac{u \Delta t}{\Delta x} < 1 \quad (3.40)$$

où u désigne la vitesse, Δt et Δx les pas de temps et d'espace. Pour des maillages fins et des vitesses élevées cette condition est très restrictive.

Afin d'accélérer le calcul, il est possible d'utiliser un pas de temps local : les pas de temps sont différents sur chaque maille. Cette technique n'est valide que si la solution recherchée est stationnaire, car l'utilisation de pas de temps différents entre les mailles rend la solution non consistante en régime instationnaire. Dans les applications visées, ce type de discrétisation peut s'avérer intéressant. En effet, la résolution des équations de Navier-Stokes nécessite d'utilisation d'un maillage très fin au niveau de la paroi alors qu'il peut être relativement grossier en amont du choc détaché. L'utilisation d'un pas de temps global imposerait le même pas de temps pour les petites et les grandes mailles. La convergence vers l'état stationnaire serait alors très longue dans les grandes mailles. L'utilisation d'un pas de temps local permet de contourner ce problème et de réduire le temps de calcul global.

Une autre méthode pour accélérer la convergence vers l'état stationnaire consiste à utiliser un schéma implicite. Le système à résoudre devient alors le suivant :

$$\frac{\mathbf{U}_{\mathbf{K}}^{n+1} - \mathbf{U}_{\mathbf{K}}^n}{t^{n+1} - t^n} + \frac{1}{|K|} \sum_{e \in \partial K} |e| \mathbf{F}_{\mathbf{K}, \mathbf{K}e}(\mathbf{U}_{\mathbf{K}}^{n+1}) = \mathbf{S}(\mathbf{U}_{\mathbf{K}}^{n+1}) \quad (3.41)$$

Ce système non linéaire est généralement linéarisé autour de la solution discrète à l'instant t^n . Le système linéaire s'écrit alors :

$$(\text{Id} + \Delta t \mathbf{A})(\mathbf{U}_{\mathbf{K}}^{n+1} - \mathbf{U}_{\mathbf{K}}^{n+1}) = \mathbf{R}(\mathbf{U}_{\mathbf{K}}^n) \quad (3.42)$$

Cette équation est résolue à chaque pas de temps. La convergence vers l'état stationnaire est obtenue lorsque le $(\mathbf{U}_{\mathbf{K}}^{n+1} - \mathbf{U}_{\mathbf{K}}^n)$ tend vers zéro, c'est-à-dire lorsque le résidu $\mathbf{R}(\mathbf{U}_{\mathbf{K}}^n)$ tend vers zéro. L'obtention des matrices $\mathbf{A}(\mathbf{U}_{\mathbf{K}}^n)$ et $\mathbf{R}(\mathbf{U}_{\mathbf{K}}^n)$ étant très fortement liée aux

choix de discrétisation spatiale, nous ne la détaillerons pas dans le manuscrit et renvoyons aux Lectures Notes du VKI de Yen [94] pour plus détails.

3.1.2.2 Application au cas du système fluide-particules

Le type de schéma permet en pratique d'atteindre des nombres CFL importants (de l'ordre de quelques milliers).

La phase particulaire est traitée avec un schéma semi-implicite et un pas de temps local. L'utilisation d'un schéma semi-implicite permet de garantir, en l'absence de fragmentation, le caractère convexe des équations de conservation de la masse, quantité de mouvement et d'énergie. Reprenons le système d'équations pour une classe i en l'absence de fragmentation. Afin de simplifier les notations, nous omettrons l'indice i lié à cette classe.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} n + \nabla_{\mathbf{x}}(n \mathbf{v}) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} n m + \nabla_{\mathbf{x}}(n m \mathbf{v}) = n m'(d) \Phi_d \\ \frac{\partial}{\partial t} n m \mathbf{v} + \nabla_{\mathbf{x}}(n m \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = n m'(d) \Phi_d \mathbf{v} + n m \Phi_{\mathbf{v}} \\ \frac{\partial}{\partial t} n m e + \nabla_{\mathbf{x}}(n m \mathbf{v} e) = n m'(d) \Phi_d e + n m \Phi_e \\ \frac{\partial}{\partial t} n m \Psi + \nabla_{\mathbf{x}}(n m \mathbf{v} \Psi) = n m'(d) \Phi_d \Psi \end{array} \right. \quad (3.43)$$

Introduisons les temps caractéristiques d'évaporation τ_{ev} , de chauffage τ_{ch} et de rappel de la force de traînée τ_{dy} :

$$\frac{-n m}{\tau_{ev}} = n m'(d) \Phi_d \Rightarrow \tau_{ev} = \frac{-d}{3 \Phi_d} \quad (3.44)$$

$$\frac{n m (\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p)}{\tau_{dy}} = n m \Phi_{\mathbf{v}} \Rightarrow \tau_{dy} = \frac{4}{3} \frac{\rho_p}{\rho_f} \frac{d}{C_D} \frac{1}{\|\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p\|} \quad (3.45)$$

$$\frac{n m (T_f - T)}{\tau_{ch}} = n m \Phi_e \Rightarrow \tau_{ch} = \frac{(T_f - T)}{\Phi_e} \quad (3.46)$$

Le système s'écrit alors sous la forme suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} n + \nabla_{\mathbf{x}}(n \mathbf{v}) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} n m + \nabla_{\mathbf{x}}(n m \mathbf{v}) = \frac{-n m}{\tau_{ev}} \\ \frac{\partial}{\partial t} n m \mathbf{v} + \nabla_{\mathbf{x}}(n m \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = \frac{-n m \mathbf{v}}{\tau_{ev}} + \frac{n m (\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p)}{\tau_{dy}} \\ \frac{\partial}{\partial t} n m e + \nabla_{\mathbf{x}}(n m \mathbf{v} e) = \frac{-n m e}{\tau_{ev}} + \frac{n m (T_f - T)}{\tau_{ch}} \\ \frac{\partial}{\partial t} n m \Psi + \nabla_{\mathbf{x}}(n m \mathbf{v} \Psi) = \frac{-n m \Psi}{\tau_{ev}} \end{array} \right. \quad (3.47)$$

Le principe de la discrétisation semi-implicite est le suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{n^{n+1} - n^n}{\Delta t} + \nabla_{\mathbf{x}}(n^n \mathbf{v}^n) = 0 \\ \frac{n^{n+1} m^{n+1} - n^n m^n}{\Delta t} + \nabla_{\mathbf{x}}(n^n m^n \mathbf{v}^n) = \frac{-n^{\mathbf{n}+1} m^{\mathbf{n}+1}}{\tau_{ev}^{\mathbf{n}}} \\ \frac{n^{n+1} m^{n+1} \mathbf{v}^{\mathbf{n}+1} - n^n m^n \mathbf{v}^n}{\Delta t} + \nabla_{\mathbf{x}}(n^n m^n \mathbf{v}^n \otimes \mathbf{v}^n) = \\ \frac{-n^{\mathbf{n}+1} m^{\mathbf{n}+1} \mathbf{v}^{\mathbf{n}+1}}{\tau_{ev}^{\mathbf{n}}} + \frac{n^{\mathbf{n}+1} m^{\mathbf{n}+1} (\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p^{\mathbf{n}+1})}{\tau_{dy}^{\mathbf{n}}} \\ \frac{n^{n+1} m^{n+1} e^{n+1} - n^n m^n e^n}{\Delta t} + \nabla_{\mathbf{x}}(n^n m^n \mathbf{v}^n e^n) \\ \frac{-n^{\mathbf{n}+1} m^{\mathbf{n}+1} e^{\mathbf{n}+1}}{\tau_{ev}^{\mathbf{n}}} + \frac{n^{\mathbf{n}+1} m^{\mathbf{n}+1} (T_f - T^{\mathbf{n}+1})}{\tau_{ch}^{\mathbf{n}}} = \\ \frac{n^{n+1} m^{n+1} \Psi^{n+1} - n^n m^n \Psi^n}{\Delta t} + \nabla_{\mathbf{x}}(n^n m^n \mathbf{v}^n \Psi^n) = \frac{-n^{\mathbf{n}+1} m^{\mathbf{n}+1} \Psi^{\mathbf{n}+1}}{\tau_{ev}^{\mathbf{n}}} \end{array} \right. \quad (3.48)$$

Il est alors possible de regrouper les termes calculés à l'instant $n + 1$ et ceux calculés à l'instant n :

$$\left\{ \begin{array}{l}
 n^{n+1} = n^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e \Phi_{n,e,K}^n |e| \\
 n^{n+1} m^{n+1} \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_{ev}^n} \right) = n^n m^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e \Phi_{nm,e,K}^n |e| \\
 n^{n+1} m^{n+1} \mathbf{v}^{n+1} \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_{ev}^n} + \frac{\Delta t}{\tau_{dy}^n} \right) = \\
 \qquad n^n m^n \mathbf{v}^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e \Phi_{nmv,e,K}^n |e| + \frac{\Delta t}{\tau_{dy}^n} n^{n+1} m^{n+1} \mathbf{u}_f \quad (3.49) \\
 n^{n+1} m^{n+1} e^{n+1} \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_{ev}^n} + \frac{\Delta t}{\tau_{ch}^n c_{p,p}} \right) = \\
 \qquad n^n m^n e^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e \Phi_{nme,e,K}^n |e| + \frac{\Delta t}{\tau_{ch}^n} n^{n+1} m^{n+1} T_f \\
 n^{n+1} m^{n+1} \Psi^{n+1} \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_{ev}^n} \right) = n^n m^n \Psi^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e \Phi_{nm\Psi,e,K}^n |e|
 \end{array} \right.$$

Les temps de calcul obtenus avec la discrétisation semi-implicite et un pas de temps local n'étant pas trop longs, l'utilisation d'un schéma implicite n'a pas été nécessaire.

3.1.3 Quelques propriétés mathématiques du schéma de discrétisation utilisé pour la phase particulaire

3.1.3.1 Préservation de la positivité du nombre de particules

Le schéma sur le nombre s'écrit sous la forme générale suivante :

$$n_K^{n+1} - n_K^n = - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e v_{e,K}^+ n_K^n |e| + \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e v_{e,K}^- n_{Ke}^n |e| \quad (3.50)$$

Supposons qu'à l'instant n , le nombre de particules soit positif dans toutes les cellules, nous avons alors :

$$n_K^{n+1} \geq n_K^n \left(1 - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e v_{e,K}^+ |e| \right) \quad (3.51)$$

Si Δt vérifie la condition CFL suivante :

$$\sup_K \sum_e \frac{|v_{e,K}| |e| \Delta t}{|K|} \leq 1 \quad (3.52)$$

alors le schéma préserve la positivité du nombre de particules.

3.1.3.2 Principe du maximum sur la masse des particules

Le schéma sur la masse s'écrit sous la forme générale suivante :

$$n_K^{n+1} m_K^{n+1} - n_K^n m_K^n = -\frac{\Delta t}{|K|} \sum_e \Phi_{e,K}^{n+} m_K^n |e| - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e \Phi_{e,K}^{n-} m_{Ke}^n |e| - \frac{n_K^{n+1} m_K^{n+1}}{\tau_{ev}^n} \Delta t \quad (3.53)$$

avec :

$$\begin{aligned} \Phi_{e,K}^{n+} &= v_{e,K}^+ n_K^n \\ \Phi_{e,K}^{n-} &= -v_{e,K}^- n_{Ke}^n \\ v_{e,K} &= \mathbf{v}_e \cdot \mathbf{n}_{e,K} \end{aligned} \quad (3.54)$$

Il peut donc s'écrire sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} n_K^{n+1} m_K^{n+1} - n_K^n m_K^n &= -\frac{\Delta t}{|K|} \sum_e v_{e,K}^+ n_K^n m_K^n |e| \\ &+ \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e v_{e,K}^- n_{Ke}^n m_{Ke}^n |e| - \frac{n_K^{n+1} m_K^{n+1}}{\tau_{ev}^n} \Delta t \end{aligned} \quad (3.55)$$

d'où :

$$m_K^{n+1} \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_{ev}^n} \right) = \frac{1}{n_K^{n+1}} \left[\underbrace{\left(1 - \sum_e v_{e,K}^+ \frac{\Delta t |e|}{|K|} \right)}_{\alpha_K} n_K^n m_K^n + \underbrace{\sum_e v_{e,K}^- \frac{\Delta t |e|}{|K|}}_{\alpha_{Ke}} n_{Ke}^n m_{Ke}^n \right] \quad (3.56)$$

Si Δt vérifie la condition CFL suivante :

$$\sup_K \sum_e \frac{|v_{e,K}| |e| \Delta t}{|K|} \leq 1 \quad (3.57)$$

alors nous avons les inégalités suivantes :

$$\alpha_K \geq 0 \quad \alpha_{Ke} \geq 0 \quad (3.58)$$

où α_K et α_{Ke} sont définis par l'équation (3.56).

De plus, nous avons la relation suivante :

$$\alpha_K n_K^n + \sum_e \alpha_{Ke} n_{Ke}^n = n_K^{n+1} \quad (3.59)$$

Le terme $m_K^{n+1} \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_{ev}^n}\right)$ est donc une combinaison convexe de m_K^n et de m_{Ke}^n .

D'où les majorations $m_K^{n+1} \geq 0$ et :

$$\left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_{ev}^n}\right) m_K^{n+1} \leq \max \left\{ \max_e (m_{Ke}^n), m_K^n \right\} \quad (3.60)$$

et donc la majoration souhaitée :

$$m_K^{n+1} \leq \max \left\{ \max_e (m_{Ke}^n), m_K^n \right\} \quad (3.61)$$

3.1.3.3 Principe du maximum sur la vitesse des particules

L'équation sur la quantité de mouvement des particules est la suivante :

$$\begin{aligned} n_K^{n+1} m_K^{n+1} \mathbf{v}_{\mathbf{K}}^{n+1} &= n_K^n m_K^n \mathbf{v}_{\mathbf{K}}^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e v_{e,K}^{n+} n_K^n m_K^n \mathbf{v}_{\mathbf{K}}^n |e| \\ &\quad + \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e v_{e,K}^{n-} n_{Ke}^n m_{Ke}^n \mathbf{v}_{\mathbf{K}e}^n |e| - n_K^{n+1} m_K^{n+1} \mathbf{v}_{\mathbf{K}}^{n+1} \frac{\Delta t}{\tau_{ev}^n} \\ &\quad + n_K^{n+1} m_K^{n+1} (\mathbf{u}_{\mathbf{K}}^n - \mathbf{v}_{\mathbf{K}}^{n+1}) \frac{\Delta t}{\tau_{dyn}^n} \end{aligned} \quad (3.62)$$

d'où :

$$\mathbf{v}_{\mathbf{K}}^{n+1} = \frac{\Delta t / \tau_{dyn}^n}{1 + \Delta t / \tau_{dyn}^n + \Delta t / \tau_{ev}^n} \mathbf{u}_{\mathbf{K}}^n + \frac{1 + \Delta t / \tau_{ev}^n}{1 + \Delta t / \tau_{dyn}^n + \Delta t / \tau_{ev}^n} \mathbf{v}_{\mathbf{K}}^* \quad (3.63)$$

avec :

$$\mathbf{v}_{\mathbf{K}}^* = \frac{1}{(1 + \Delta t / \tau_{ev}^n) (n_K^{n+1} m_K^{n+1})} \left\{ \alpha_K n_K^n m_K^n \mathbf{v}_{\mathbf{K}}^n + \sum_e \alpha_{Ke} n_{Ke}^n m_{Ke}^n \mathbf{v}_{\mathbf{K}e}^n \right\} \quad (3.64)$$

or, par définition du schéma sur la masse nous avons la relation suivante :

$$n_K^{n+1} m_K^{n+1} \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_{ev}^n}\right) = \alpha_K n_K^n m_K^n + \sum_e \alpha_{Ke} n_{Ke}^n m_{Ke}^n \quad (3.65)$$

d'où le fait que $\mathbf{v}_{\mathbf{K}}^*$ est aussi une combinaison convexe de $\mathbf{v}_{\mathbf{K}}^n$ et de $\mathbf{v}_{\mathbf{K}\mathbf{e}}^n$.

Il est alors possible de faire le même raisonnement sur $\mathbf{v}_{\mathbf{K}}^{n+1}$ qui est encore une combinaison convexe de $\mathbf{u}_{\mathbf{K}}^n$ et $\mathbf{v}_{\mathbf{K}}^*$, ce qui conclut la démonstration du principe du maximum en vitesse.

3.1.3.4 Principe du maximum sur l'énergie et le facteur de déformation

Pour l'énergie, en utilisant la relation reliant l'énergie à la température :

$$e^n = c_{p,p} T^n \quad (3.66)$$

où $c_{p,p}$ désigne la capacité thermique des particules supposée constante et en utilisant l'équation sur l'évolution de l'énergie des particules :

$$\begin{aligned} n_K^{n+1} m_K^{n+1} e_K^{n+1} = & n_K^n m_K^n e_K^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e v_{e,K}^{n+} n_K^n m_K^n e_K^n |e| + \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e v_{e,K}^{n-} n_{Ke}^n m_{Ke}^n e_{Ke}^n |e| \\ & - n_K^{n+1} m_K^{n+1} e_K^{n+1} \frac{\Delta t}{\tau_{ev}^n} + n_K^{n+1} m_K^{n+1} \left(T_{f,K}^n - T_{p,K}^{n+1} \right) \frac{\Delta t}{\tau_{ch}^n} \end{aligned} \quad (3.67)$$

L'équation (3.67) possède la même structure que celle sur la vitesse ce qui permet de conclure que l'énergie vérifie aussi le principe du maximum.

Enfin, l'équation régissant le comportement du facteur de déformation étant similaire à celle régissant la masse des particules :

$$\begin{aligned} n_K^{n+1} m_K^{n+1} \Psi_K^{n+1} = & n_K^n m_K^n \Psi_K^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e v_{e,K}^{n+} n_K^n m_K^n \Psi_K^n |e| \\ & + \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e v_{e,K}^{n-} n_{Ke}^n m_{Ke}^n \Psi_{Ke}^n |e| - n_K^{n+1} m_K^{n+1} \Psi_K^{n+1} \frac{\Delta t}{\tau_{ev}^n} \end{aligned} \quad (3.68)$$

le facteur de déformation vérifie lui aussi le principe du maximum.

3.1.4 Traitement numérique de la configuration axisymétrique

Cette technique permet de modéliser une configuration 3D qui est invariante par rotation autour d'un axe (comme dans le cas d'une sphère) à partir des équations 2D. Ci-dessous, nous détaillons les modifications à effectuer sur les équations de la phase particulaire pour prendre en compte l'axisymétrie du problème.

Reprenons le système initial pour la conservation du nombre de particules :

$$\frac{\partial}{\partial t} n + \nabla_{\mathbf{x}}^{3D} (n \mathbf{v}) = 0 \quad (3.69)$$

Plaçons-nous dans le repère cylindrique (r, θ, z) . Dans ce repère, l'équation devient :

$$\frac{\partial}{\partial t} n + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (n r v_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} (n v_\theta) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial z} (n r v_z) = 0 \quad (3.70)$$

Dans l'hypothèse d'une configuration axisymétrique, $\partial/\partial\theta = 0$. Si nous supposons de plus que les particules n'ont pas de vitesse v_θ , l'équation devient alors :

$$\frac{\partial}{\partial t} n + \frac{\partial}{\partial r} (n v_r) + \frac{\partial}{\partial z} (n v_z) = -\frac{n v_r}{r} \quad (3.71)$$

Cette équation est semblable à celle obtenue dans le cas 2D plan (r, z) , à condition de retrancher le terme source : $(n v_r)/r$. En effectuant les calculs pour les autres variables, le système global devient :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} n + \nabla_{\mathbf{x}}^{2D} (n \mathbf{v}) = -\frac{n v_r}{r} \\ \frac{\partial}{\partial t} n m + \nabla_{\mathbf{x}}^{2D} (n m \mathbf{v}) = \frac{-n m}{\tau_{ev}} - \frac{n m v_r}{r} \\ \frac{\partial}{\partial t} n m \mathbf{v} + \nabla_{\mathbf{x}}^{2D} (n m \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = \frac{-n m \mathbf{v}}{\tau_{ev}} + \frac{n m (\mathbf{u}_f - \mathbf{v}_p)}{\tau_{dy}} - \frac{n m \mathbf{v} v_r}{r} \\ \frac{\partial}{\partial t} n m e + \nabla_{\mathbf{x}}^{2D} (n m \mathbf{v} e) = \frac{-n m e}{\tau_{ev}} + \frac{n m (T_f - T)}{\tau_{ch}} - \frac{n m e v_r}{r} \\ \frac{\partial}{\partial t} n m \Psi + \nabla_{\mathbf{x}}^{2D} (n m \mathbf{v} \Psi) = \frac{-n m \Psi}{\tau_{ev}} - \frac{n m \Psi v_r}{r} \end{array} \right. \quad (3.72)$$

Les termes sources liés à l'hypothèse d'axisymétrie faisant apparaître des quantités proportionnelles à celles calculées, nous pouvons introduire le temps caractéristique :

$$\tau_{axi} = \frac{r}{v_r} \quad (3.73)$$

Il est alors possible de généraliser la méthode d'intégration temporelle semi-implicite pour prendre en compte les termes sources d'axisymétrie :

$$\left\{ \begin{array}{l}
 n^{n+1} \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_{axi}^n} \right) = n^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e \Phi_{n,e,K}^n |e| \\
 n^{n+1} m^{n+1} \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_{ev}^n} + \frac{\Delta t}{\tau_{axi}^n} \right) = n^n m^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e \Phi_{nm,e,K}^n |e| \\
 n^{n+1} m^{n+1} \mathbf{v}^{n+1} \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_{ev}^n} + \frac{\Delta t}{\tau_{dy}^n} + \frac{\Delta t}{\tau_{axi}^n} \right) = \\
 \qquad n^n m^n \mathbf{v}^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e \Phi_{nmv,e,K}^n |e| + \frac{\Delta t}{\tau_{dy}^n} n^{n+1} m^{n+1} \mathbf{u}_f \\
 n^{n+1} m^{n+1} e^{n+1} \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_{ev}^n} + \frac{\Delta t}{\tau_{ch}^n} c_{p,p} + \frac{\Delta t}{\tau_{axi}^n} \right) = \\
 \qquad n^n m^n e^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e \Phi_{nme,e,K}^n |e| + \frac{\Delta t}{\tau_{ch}^n} n^{n+1} m^{n+1} T_f \\
 n^{n+1} m^{n+1} \Psi^{n+1} \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_{ev}^n} + \frac{\Delta t}{\tau_{axi}^n} \right) = n^n m^n \Psi^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e \Phi_{nm\Psi,e,K}^n |e|
 \end{array} \right. \quad (3.74)$$

Le traitement de l'axisymétrie est ainsi fortement simplifié. Le calcul ainsi que les propriétés du schéma restent inchangés.

3.1.5 Traitement numérique des conditions aux limites

Le domaine de calcul, tel que schématisé sur la figure 3.1, possède quatre types de frontière :

- le type paroi
- le type entrée supersonique
- le type sortie supersonique
- le type axe de symétrie

Nous nous limiterons volontairement au traitement de la phase particulière. La phase fluide étant traitée *via* l'introduction de deux mailles fictives, aux extrémités du domaine,

dont les valeurs sont imposées. Cela est classiquement fait dans les codes volumes finis traitant les équations de Navier-Stokes [83–85].

Pour la phase particulaire, nous avons le traitement suivant pour les différents types de frontière :

La frontière amont : les propriétés du fluide et des particules sont imposées en amont du calcul dans des mailles fictives et elles se propagent ensuite dans tout le domaine de calcul. Il faut concevoir le maillage de sorte que le choc détaché soit suffisamment loin de la frontière amont.

La frontière aval : c'est une condition de sortie libre, les deux mailles fictives sont remplies avec les valeurs de la dernière maille.

L'axe : le traitement de l'axe se fait en symétrisant les valeurs de la solution discrète dans les mailles fictives : les particules "fictives" ont les mêmes propriétés thermodynamiques mais des vitesses symétriques.

Le type paroi : des particules sont émises depuis la paroi pour prendre en compte le rebond et l'érosion (sur la base du modèle exposé dans la partie 2.1.3 page 58 et la publication [55])

3.1.6 Traitement numérique des termes de rétroaction

L'algorithme de couplage entre la phase fluide et la phase particulaire est décrit sur la figure 3.5 :

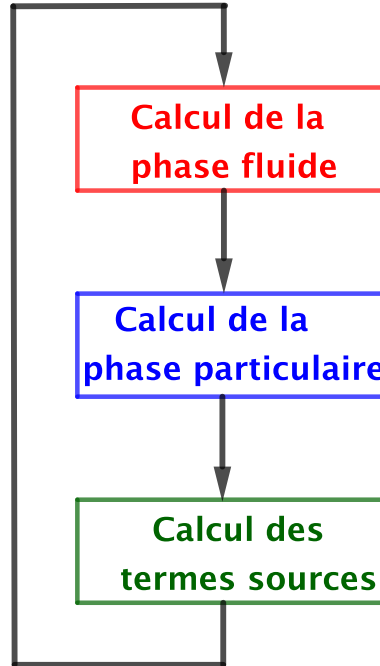


FIGURE 3.5 – Algorithme de couplage entre les deux phases

Deux types de couplage sont possibles :

- Un couplage dit "stationnaire" dans lequel les blocs décrits sur la figure 3.5 correspondent au calcul de l'état stationnaire de chaque phase. Dans cette configuration, le couplage est effectué après la stationnarisation de chaque phase.
- Un couplage dit "instationnaire" dans lequel les blocs décrits sur la figure 3.5 correspondent au calcul d'une seule itération. Dans cette configuration, le couplage est effectué à chaque pas de temps.

Afin d'éviter la divergence du calcul lorsque la fraction massique de particules est trop importante, nous avons mis en place une méthode de relaxation. Le terme source transmis au fluide au temps $n+1$ (à l'itération n dans le cas d'un couplage stationnaire) est calculé à partir des termes sources de la phase particulaire pris aux temps (respectivement à l'itération) n et $n-1$:

$$S_f^{n+1} = \omega S_p^n + (1 - \omega) S_p^{n-1} \quad (3.75)$$

ω est un paramètre de relaxation compris entre 0 et 1 qui est ajusté afin d'assurer la convergence de l'algorithme. Lorsque la concentration en particules est importante, il est nécessaire de choisir $\omega < 1$. Cette méthode peut être utilisée, sans restriction, afin d'obtenir des solutions stationnaires car la solution à convergence ne dépend pas de ω . Par contre, dans le cas instationnaire, la relaxation agit (voir ci-dessous) comme un filtrage passe-bas du terme source avec un temps de coupure de l'ordre de $\Delta t/\omega$. Il n'est donc pas possible de choisir ω trop petit sous peine de perdre la consistance de la discrétisation temporelle.

3.1.6.1 Etude de la stabilité du système couplé avec relaxation

Pour comprendre l'intérêt en terme de stabilité numérique d'introduire un paramètre de relaxation ω , considérons le système différentiel suivant :

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = \beta \frac{v - u}{\tau} + f \\ \frac{dv}{dt} = \frac{u - v}{\tau} \end{cases} \quad (3.76)$$

où β et τ sont deux constantes strictement positives et f une fonction donnée du temps, jouant le rôle de "forçage" extérieur au système. u correspond dans notre cas à la vitesse de la phase fluide et v à celle de la phase particulaire. β peut-être assimilé au taux de chargement massique en particules. En pratique, nous nous attendons à avoir des problèmes de stabilité si $\beta > 1$ et si $\tau \ll T$ où T est l'échelle de temps caractéristique du terme de forçage.

La méthode de relaxation décrite ci-dessus consiste dans le cas du système (3.76) à utiliser le schéma numérique suivant :

$$\begin{cases} \frac{v^{n+1} - v^n}{\Delta t} = \frac{u^n - v^{n+1}}{\tau} \\ S^{n+1} = -\omega \beta \frac{u^n - v^{n+1}}{\tau} + (1 - \omega) S^n \\ \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = S^{n+1} + f^{n+1} \end{cases} \quad (3.77)$$

avec par définition $S^0 = 0$.

Le système (3.77) peut s'interpréter comme une discrétisation du système différentiel suivant :

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = S + f \\ \frac{dv}{dt} = \frac{u - v}{\tau} \\ \frac{dS}{dt} = \frac{1}{\tau_*} \left(-\beta \frac{u - v}{\tau} - S \right) \end{cases} \quad (3.78)$$

où τ^* est une constante strictement positive. En effet, il est possible de discrétiser le système (3.78) à l'aide du schéma semi-implicite suivant :

$$\begin{cases} \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = S^{n+1} + f^{n+1} \\ \frac{v^{n+1} - v^n}{\Delta t} = \frac{u^n - v^{n+1}}{\tau} \\ \frac{S^{n+1} - S^n}{\Delta t} = \frac{1}{\tau_*} \left(-\beta \frac{u^n - v^{n+1}}{\tau} - S^{n+1} \right) \end{cases} \quad (3.79)$$

où seul le terme u est traité de manière explicite (comme la vitesse du fluide dans le schéma utilisé pour discrétiser le système de la phase particulaire).

D'après la dernière équation de (3.79), nous pouvons écrire :

$$S^{n+1} = \frac{\beta \Delta t / \tau_*}{1 + \Delta t / \tau_*} \frac{v^{n+1} - u^n}{\tau} + \frac{1}{1 + \Delta t / \tau_*} S^n \quad (3.80)$$

Posons alors $\omega = \frac{\Delta t / \tau^*}{1 + \Delta t / \tau^*}$, le système est équivalent au système (3.77). $\omega = 1$ (pas de relaxation) correspond au cas $\tau_* = 0$ (car Δt est fixé), donc intuitivement au cas où S relaxe instantanément vers $\beta \frac{v - u}{\tau}$ et où le système (3.78) est exactement équivalent au système (3.77). Au contraire, prendre ω tel que $0 < \omega < 1$ revient formellement à remplacer (3.77) par (3.78) avec τ_* fini. Pour que (3.78) soit une bonne approximation de (3.77), il faut que $\tau_* \ll T$, ce qui fixe une borne inférieure pour ω .

Le système (3.78) est stable. En effet :

$$(3.78) \Rightarrow \begin{cases} \frac{dW}{dt} = -\frac{W}{\tau} + S + f \\ \frac{dS}{dt} = \frac{-\beta W}{\tau \tau_*} - \frac{S}{\tau_*} \end{cases} \quad (3.81)$$

où $W = u - v$, c'est à dire :

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} W \\ S \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} -\frac{1}{\tau} & 1 \\ \frac{-\beta}{\tau \tau_*} & -\frac{1}{\tau_*} \end{pmatrix}}_A \begin{pmatrix} W \\ S \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} f \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.82)$$

En appelant λ_1 et λ_2 les valeurs propres de A , nous avons les relations suivantes :

$$\begin{aligned} \lambda_1 \lambda_2 &= \det(A) = \frac{1 + \beta}{\tau \tau_*} > 0 \\ \lambda_1 + \lambda_2 &= \text{tr}(A) = \frac{-1}{\tau} - \frac{-1}{\tau_*} < 0 \end{aligned} \quad (3.83)$$

Si λ_1 et λ_2 sont toutes les deux réelles, nous pouvons en déduire que les valeurs propres sont nécessairement strictement négatives, d'où la stabilité du système.

Si λ_1 et λ_2 sont complexes conjuguées, nous avons :

$$\lambda_1 = a + ib \quad \text{et} \quad \lambda_2 = a - ib \quad (3.84)$$

avec $\lambda_1 + \lambda_2 = 2a < 0$. Il en résulte également la stabilité du système.

Analysons maintenant ce qu'il en est du système discret (3.77) et montrons que la stabilité implique une condition sur ω .

Notons tout d'abord que :

$$(3.79) \Rightarrow \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau}\right) v^{n+1} = v^n + \frac{\Delta t}{\tau} u^n \Rightarrow v^{n+1} = \frac{1}{1 + \Delta t/\tau} \left(v^n + \frac{\Delta t}{\tau} u^n\right) \quad (3.85)$$

Nous en déduisons alors :

$$u^n - v^{n+1} = \frac{1}{1 + \Delta t/\tau} (u^n - v^n) \quad (3.86)$$

Finalement, nous en déduisons les deux relations suivantes :

$$\frac{W^{n+1} - W^n}{\Delta t} = \frac{-1}{1 + \Delta t/\tau} \frac{W^n}{\tau} + S^{n+1} + f^{n+1} \quad (3.87)$$

$$S^{n+1} = \frac{-\beta\omega}{1 + \Delta t/\tau} \frac{W^n}{\tau} + (1 - \omega) S^{n+1} \quad (3.88)$$

où W est défini par $W^n = u^n - v^n$.

Posons alors $Y = \frac{\Delta t}{\tau}$, (3.87) et (3.88) donnent finalement le système suivant :

$$\begin{cases} W^{n+1} = \left(1 - \frac{Y}{1+Y}\right) W^n + \Delta t S^{n+1} + \Delta t f^{n+1} \\ S^{n+1} = -\frac{\omega\beta Y}{(1+Y)\Delta t} W^n + (1-\omega) S^n \end{cases} \quad (3.89)$$

Soit encore :

$$\begin{cases} W^{n+1} = \frac{1}{1+Y} (1 - \omega\beta Y) W^n + (1-\omega) \Delta t S^n + \Delta t f^{n+1} \\ S^{n+1} = -\frac{\omega\beta Y}{(1+Y)\Delta t} W^n + (1-\omega) S^n \end{cases} \quad (3.90)$$

Soit encore :

$$\begin{pmatrix} W^{n+1} \\ S^{n+1} \end{pmatrix} = B \begin{pmatrix} W^n \\ S^n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \Delta t f^{n+1} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.91)$$

Le système (3.91) est stable si et seulement si les valeurs propres de B sont toutes de modules strictement inférieur à 1, avec :

$$B = \begin{pmatrix} \frac{1 - \omega\beta Y}{1+Y} & (1-\omega) \Delta t \\ \frac{-\omega\beta Y}{(1+Y)\Delta t} & (1-\omega) \end{pmatrix} \quad (3.92)$$

Pour conclure, nous aurons besoin du lemme suivant :

Lemme : Soit le polynôme suivant :

$$p(\lambda) = \lambda^2 - b\lambda + a \quad (3.93)$$

Supposons que $0 \leq b < 1$ et que $0 \leq a < 1$, alors les deux racines de p vérifient $|\lambda_i| < 1$

Preuve : Nous avons les relations suivantes :

$$\lambda_1 + \lambda_2 = b \quad \text{et} \quad \lambda_1 \lambda_2 = a \quad (3.94)$$

premier cas : le discriminant du polynôme Δ_{pol} est strictement négatif. Les deux racines du polynôme s'écrivent alors :

$$\lambda_1 = \frac{b}{2} + i \frac{\sqrt{-\Delta_{pol}}}{2} \quad \lambda_2 = \frac{b}{2} - i \frac{\sqrt{-\Delta_{pol}}}{2} \quad (3.95)$$

Nous avons alors les relations suivantes :

$$|\lambda_1|^2 = |\lambda_2|^2 = |\lambda_1 \lambda_2| = a < 1 \quad (3.96)$$

ce qui conclut la démonstration.

deuxième cas : le discriminant du polynôme Δ_{pol} est positif. Les deux racines du polynôme s'écrivent alors :

$$\lambda_1 = \frac{b}{2} + \frac{\sqrt{\Delta_{pol}}}{2} \quad \lambda_2 = \frac{b}{2} - \frac{\sqrt{\Delta_{pol}}}{2} \quad (3.97)$$

Comme a est positif, nous avons :

$$\Delta = b^2 - 4a \leq b^2 \Rightarrow \sqrt{\Delta_{pol}} \leq b \quad (3.98)$$

D'où :

$$\lambda_1 = \frac{b}{2} + \frac{\sqrt{\Delta_{pol}}}{2} \Rightarrow 0 \leq \lambda_1 \leq b < 1 \quad \lambda_2 = \frac{b}{2} - \frac{\sqrt{\Delta_{pol}}}{2} \Rightarrow 0 \leq \lambda_2 \leq b < 1 \quad (3.99)$$

Ce qui conclut la démonstration du lemme.

Revenons à notre démonstration : le polynôme caractéristique de B s'écrit :

$$\lambda^2 - \text{tr}(B) \lambda + \det(B) = 0 \quad (3.100)$$

avec :

$$\text{tr}(B) = \frac{1 - \omega \beta Y}{1 + Y} + (1 - \omega) \quad (3.101)$$

$$\det(B) = \frac{1 - \omega}{1 + Y} \in [0,1[\quad \forall \omega \in [0,1[\quad (3.102)$$

D'après le lemme précédent, il suffit donc que :

$$0 \leq \text{tr}(\mathbf{B}) < 1 \quad (3.103)$$

pour que le système (3.91) (et donc le système (3.77)) soit stable, ce qui impose les conditions suivantes :

$$\begin{aligned} 0 &\leq \text{tr}(\mathbf{B}) < 1 \\ \Leftrightarrow 0 &\leq \frac{1}{1+Y} - \frac{Y}{1+Y} \omega \beta + (1-\omega) < 1 \\ \Leftrightarrow -1 - \frac{1}{1+Y} &\leq -\left(\frac{Y\beta}{1+Y} + 1\right) \omega < \frac{-1}{1+Y} \\ \Leftrightarrow \frac{1}{1+Y} &< \left(1 + \frac{Y\beta}{1+Y}\right) \omega \leq \frac{2+Y}{1+Y} \\ \Leftrightarrow \frac{1}{1+Y+Y\beta} &< \omega \leq \frac{2+Y}{1+Y+Y\beta} \end{aligned} \quad (3.104)$$

En pratique, il suffit donc de choisir :

$$\begin{aligned} \omega &= \frac{2+Y}{1+Y+Y\beta} && \text{si } Y\beta > 1 \\ \omega &= 1 && \text{si } Y\beta \leq 1 \end{aligned} \quad (3.105)$$

pour que le système discret soit stable. Nous constatons qu'il n'est pas nécessaire d'utiliser un paramètre de relaxation lorsque $Y\beta \leq 1$, (ce qui correspond en pratique à un taux de chargement massique faible ou un pas de temps petit devant le temps caractéristique des particules).

Si au contraire, $\beta \gg 1$ et $\Delta t \gg \tau$ (c'est à dire $Y \simeq +\infty$), nous obtenons :

$$\omega \simeq \frac{1}{\beta} \ll 1 \quad (3.106)$$

Pour que la méthode reste précise, il faut que :

$$\tau_* \simeq \frac{\Delta t}{\omega} \ll T \quad (3.107)$$

c'est-à-dire :

$$\tau \ll \Delta t \ll \frac{T}{\beta} \quad (3.108)$$

3.2 Résultats des tests de validation sur des configurations académiques

L'objectif de cette partie est de présenter les résultats d'une série de tests académiques réalisés dans le but d'éprouver le modèle et la méthode numérique exposés ci-dessus, ainsi que leur implémentation dans le code SDFS (Supersonic Dilute Flow Solver). Le code étant constitué de deux solveurs indépendants associés à chaque phase et couplés par l'échange de termes sources et de certains champs (cf. Fig. 3.6), il est possible de le valider par bloc. Dans un premier temps, nous effectuons la validation des deux solveurs pris séparément puis, dans un second temps, la validation globale tenant compte du couplage. Le solveur fluide étant préexistant au travail présenté dans ce manuscrit et ayant fait l'objet de nombreuses vérifications, il sera considéré comme validé dans la suite du travail. Il convient donc de considérer la validation du solveur particulaire seul puis de l'ensemble. Dans cette partie, nous ne traiterons pas de la fragmentation qui sera abordée au chapitre suivant.

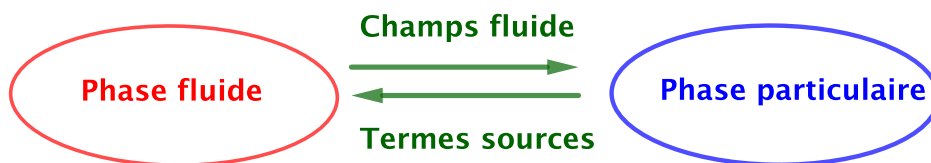


FIGURE 3.6 – Structure du code SDFS

3.2.1 Cas d'épreuve #1 : Validation du traitement numérique du transport et des phénomènes thermiques

En l'absence de fragmentation, les particules sont soumises à deux effets :

- les forces aérodynamiques : ici la force de traînée,
- les effets thermiques, avec le chauffage et l'évaporation.

Afin de valider l'implémentation numérique du modèle, nous avons créé le cas test suivant. Soit un domaine carré de taille $1mm$ par $1mm$. Les caractéristiques du fluide sont imposées et sont constantes dans tout le domaine (pas de two-way coupling). Nous injectons des particules de diamètre de $1\mu m$ en continu sur la première maille en bas à gauche du carré (cf. Fig. 3.7). Les particules traversent le domaine puis sortent de celui-ci. Le comportement global de la phase particulaire est identique à celui d'une seule particule. C'est pourquoi nous pouvons comparer les résultats du code SDFS et ceux d'un code Lagrangien servant ici de référence.

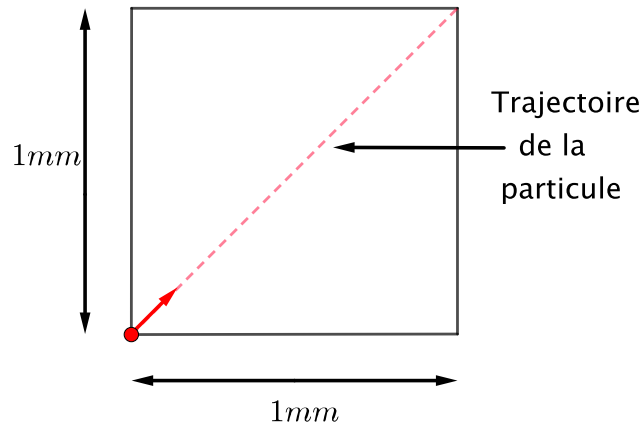


FIGURE 3.7 – Présentation du cas test de validation

Nous avons utilisé trois maillages différents dont nous détaillons les caractéristiques dans le tableau ci-dessous (cf. tableau 3.1) :

	Maillage 1	Maillage 2	Maillage 3
ΔX	$10\mu m$	$2\mu m$	$1\mu m$
ΔY	$10\mu m$	$2\mu m$	$1\mu m$
Nombre de mailles	10 000	250 000	1 000 000

TABLE 3.1 – Caractéristiques des différents maillages utilisés

Le tableau 3.2, récapitule les caractéristiques du fluide et de la phase particulaire à l'injection. Les conditions sont volontairement symétriques, ie $u_f^x = u_f^y$ et $v^x = v^y$ afin de s'assurer que la symétrie est préservée au cours du calcul.

	Fluide	Particules
Vitesse horizontale	$10 m.s^{-1}$	$100 m.s^{-1}$
Vitesse verticale	$10 m.s^{-1}$	$100 m.s^{-1}$

TABLE 3.2 – Conditions initiales du calcul pour les deux phases

Nous effectuons dans un premier temps des simulations dans lesquelles les effets thermiques ne sont pas pris en compte. Les figures 3.8, 3.9 représentent les champs de vitesse horizontaux des particules pour les deux premiers maillages. Nous avons successivement utilisé le schéma de discrétisation spatiale d'ordre 1 et d'ordre 2. Comme attendu, l'augmentation de l'ordre de discrétisation spatiale permet de réduire de manière significative la diffusion numérique. Le résultat obtenu sur le maillage 1 avec l'ordre 2 est aussi précis

que celui obtenu sur le maillage 2, qui est cinq fois plus fin, et l'ordre 1. La préservation de la symétrie est aussi validée.

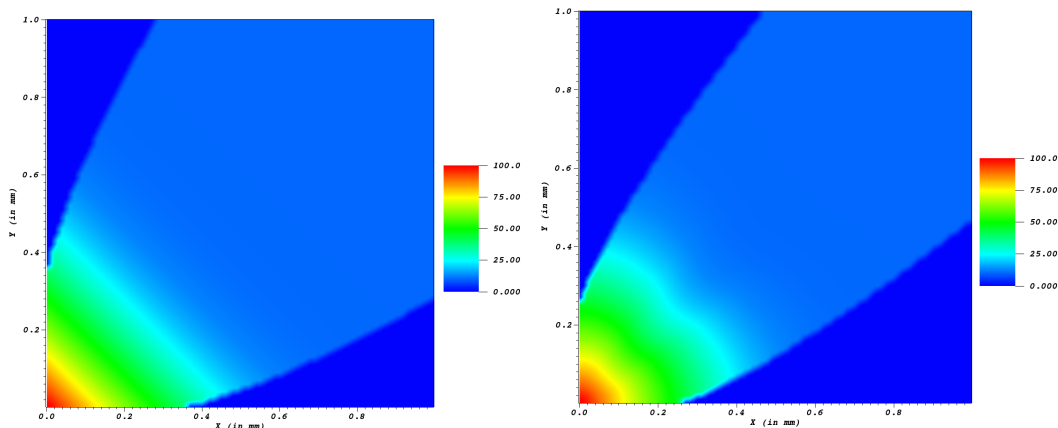


FIGURE 3.8 – Évolution du champ de vitesse horizontale de la phase particulaire. Maillage utilisé : maillage 1. Ordre de la discrétisation spatiale : ordre 1 (à gauche), ordre 2 (à droite)

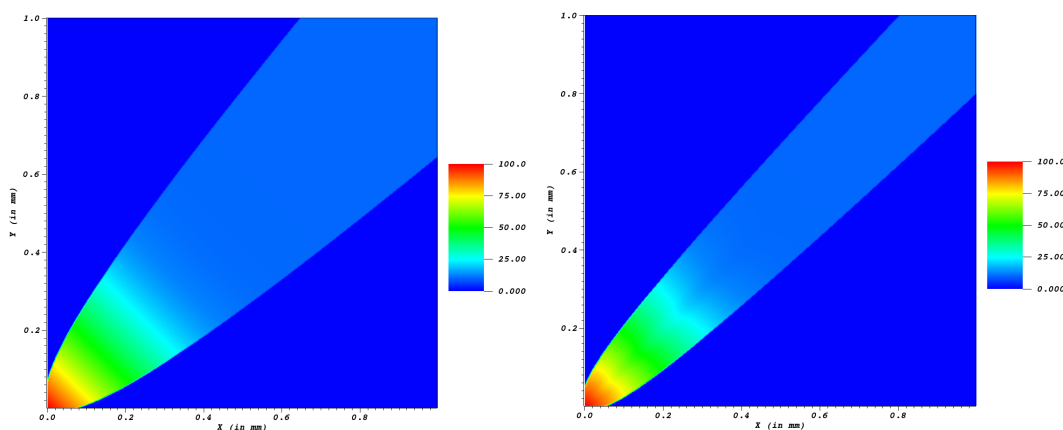


FIGURE 3.9 – Évolution du champ de vitesse horizontale de la phase particulaire. Maillage utilisé : maillage 2. Ordre de la discrétisation spatiale : ordre 1 (à gauche), ordre 2 (à droite)

Afin de considérer un cas plus général, nous avons introduit une dissymétrie dans les conditions du fluide, telles que décrites dans le tableau ci-dessous (cf. tableau 3.3).

	Fluide	Particules
Vitesse horizontale	14.15 m.s^{-1}	100 m.s^{-1}
Vitesse verticale	0 m.s^{-1}	100 m.s^{-1}

TABLE 3.3 – Conditions initiales du calcul pour les deux phases

Les effets thermiques ne sont toujours pas pris en compte. La figure 3.10 représente les champs de vitesses horizontaux de la phase particulaire. Le maillage 3 est utilisé et les

ordres de discrétisation spatiale sont comparés. L'amélioration apportée par la montée en ordre est évidente : l'utilisation de l'ordre 2 sur le maillage 3 permet d'avoir très peu de diffusion numérique.

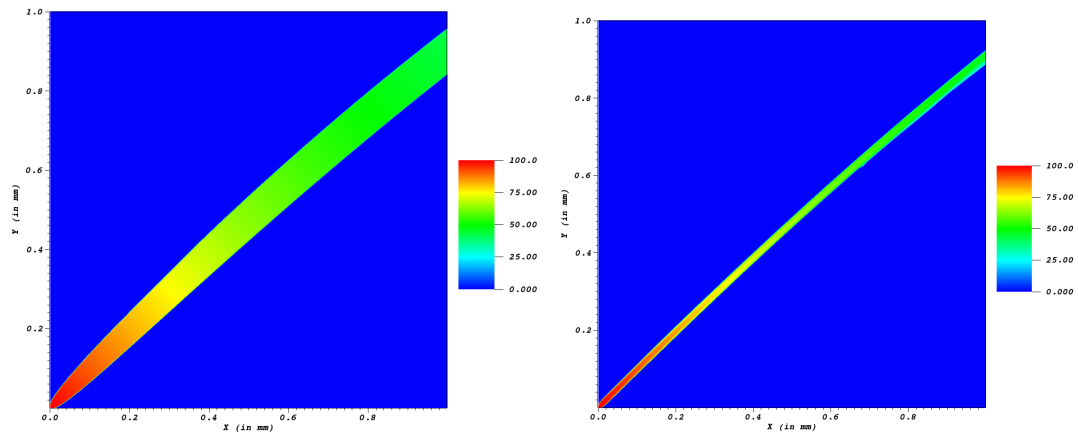


FIGURE 3.10 – Évolution du champ de vitesse horizontale de la phase particulaire. Maillage utilisé : maillage 3. Ordre de la discrétisation spatiale : ordre 1 (à gauche), ordre 2 (à droite)

Enfin, en reprenant les conditions initiales décrites dans le tableau 3.3, nous avons traité un dernier cas de validation en tenant compte des effets thermiques. Le modèle utilisé est le modèle ablatif pour lequel la conductivité de la chaleur dans les particules est supposée négligeable. Dans ce cas, la température de la phase particulaire ne varie pas mais son diamètre diminue. Ci-dessous, la figure 3.11 montre le champ de diamètre de la phase particulaire. Encore une fois, l'utilisation du schéma d'ordre 2 sur ce maillage permet d'avoir très peu de diffusion numérique et sur le plan qualitatif, les résultats obtenus semblent parfaitement cohérents.

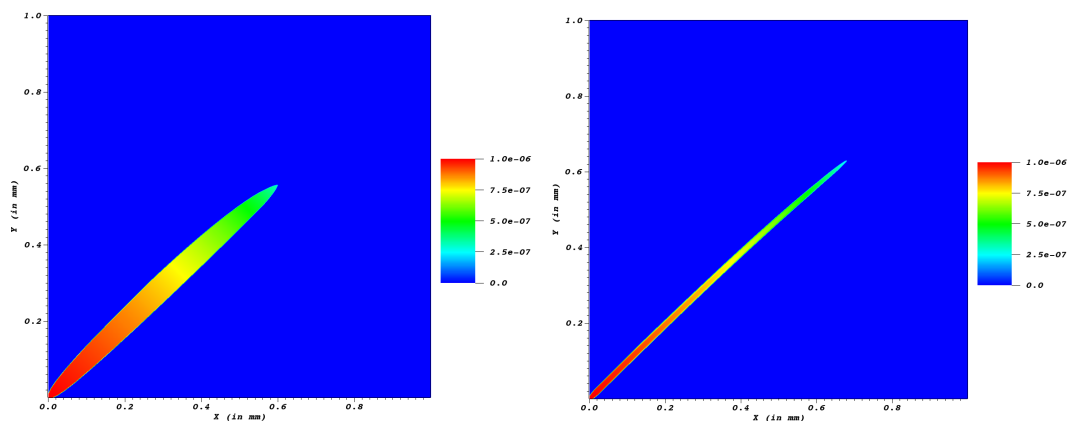


FIGURE 3.11 – Évolution du champ de diamètre de la phase particulaire. Maillage utilisé : maillage 3. Ordre de la discrétisation spatiale : ordre 1 (à gauche,) ordre 2 (à droite)

Pour terminer et valider qualitativement les résultats obtenus, il reste à présenter la comparaison avec la méthode Lagrangienne.

Si dans un premier temps, nous considérons que la phase particulaire ne subit pas d'effets thermiques, il est possible de calculer les positions x_{ref}, y_{ref} et vitesses v_{ref}^x, v_{ref}^y d'une particule de référence en résolvant les équations suivantes :

$$\begin{aligned} \frac{dx_{ref}}{dt} &= v_{ref}^x & \frac{dy_{ref}}{dt} &= v_{ref}^y \\ \frac{dv_{ref}^x}{dt} &= \frac{\pi}{8} d_{ref}^2 \rho_f C_D |u_f^x - v_{ref}^x| (u_f^x - v_{ref}^x) & (3.109) \\ \frac{dv_{ref}^y}{dt} &= \frac{\pi}{8} d_{ref}^2 \rho_f C_D |u_f^y - v_{ref}^y| (u_f^y - v_{ref}^y) \end{aligned}$$

La résolution de ces équations donne accès aux positions et vitesses en fonction du temps. Dans un premier temps, nous traçons la trajectoire de la particule de référence et la trajectoire moyenne de la phase particulaire obtenue avec la méthode Eulérienne (cf. Fig 3.12). La parfaite concordance entre les deux résultats permet, à présent, de comparer les résultats obtenus par le code et par la simulation Lagrangienne en fonction de la position x .

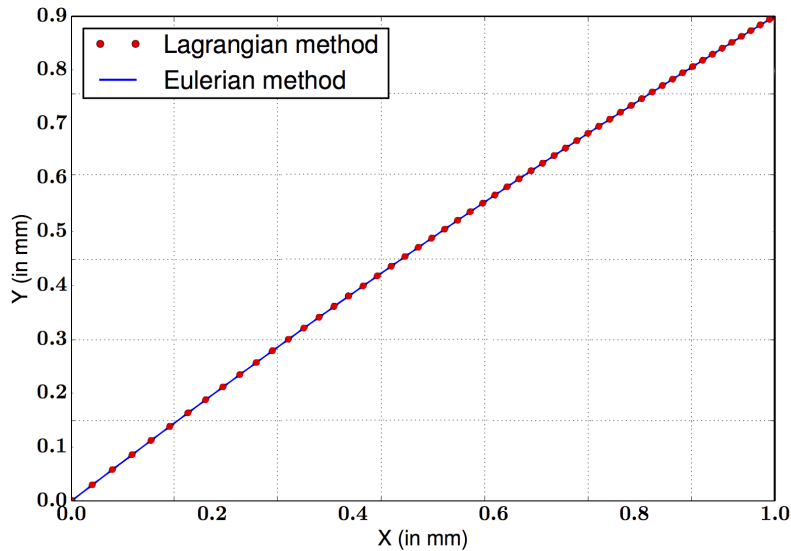


FIGURE 3.12 – Comparaison de la trajectoire moyenne de la phase particulaire calculée avec l'approche Eulérienne et la trajectoire de la particule de référence calculée avec la méthode Lagrangienne

Nous représentons ensuite, pour la phase particulaire et la particule de référence :

- l'évolution de la vitesse horizontale en fonction de la position x (cf. Fig. 3.13)
- le champ de vitesse horizontale sur le maillage 3 (cf. Fig. 3.14)
- l'évolution de la vitesse verticale en fonction de la position x (cf. Fig. 3.15)
- le champ de vitesse verticale sur le maillage 3 (cf. Fig. 3.16)

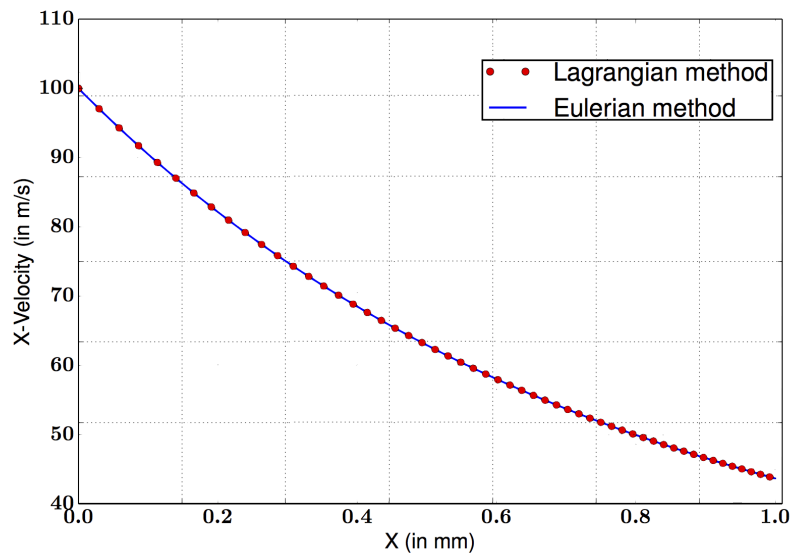


FIGURE 3.13 – Évolution de la vitesse horizontale en fonction de x . Comparaison entre la solution Eulérienne et la solution Lagrangienne de référence

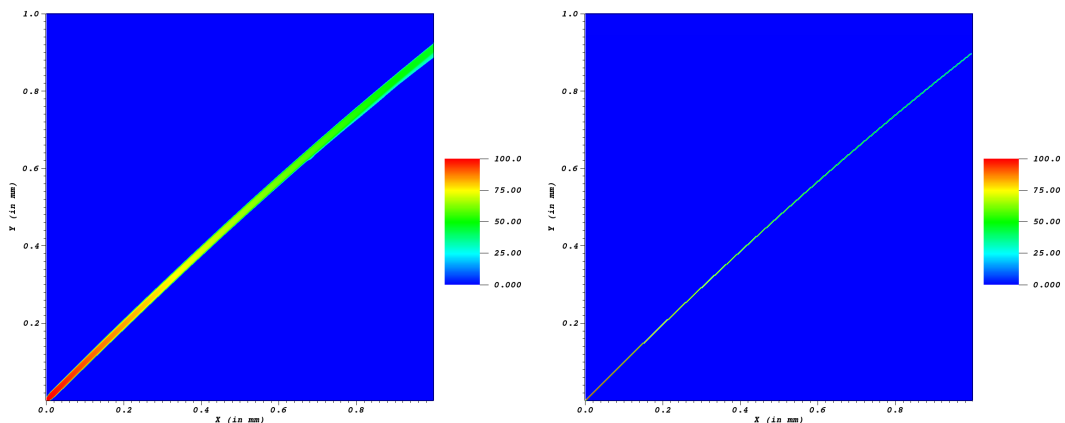


FIGURE 3.14 – Champ de vitesse horizontale. Comparaison entre la solution Eulérienne (à gauche) et la solution Lagrangienne de référence (à droite)

L'ensemble des comparaisons valide le calcul de la trajectoire et des vitesses pour la phase particulière. Il ne reste plus qu'à valider l'implémentation numérique des effets thermiques.

Le dernier test de validation considéré est une extension du précédent dans lequel les effets thermiques ne sont plus négligés. L'équation d'évolution du diamètre de la particule de

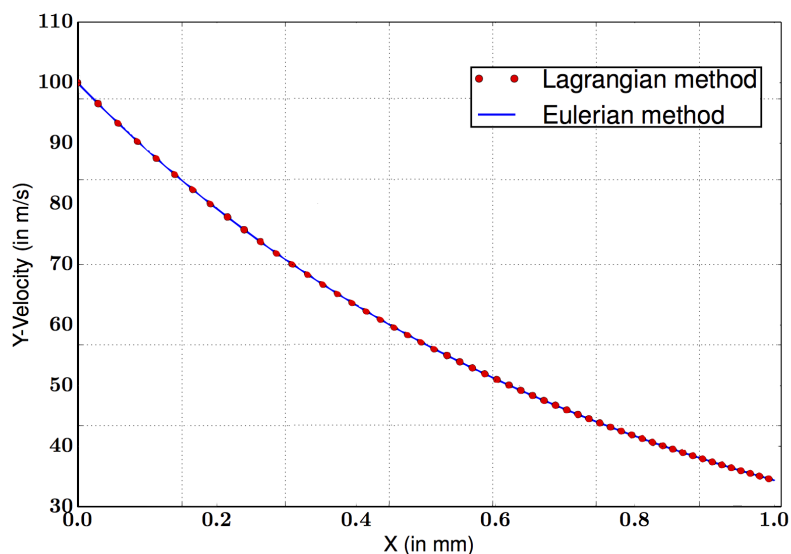


FIGURE 3.15 – Évolution de la vitesse verticale en fonction de x . Comparaison entre la solution Eulérienne et la solution Lagrangienne de référence

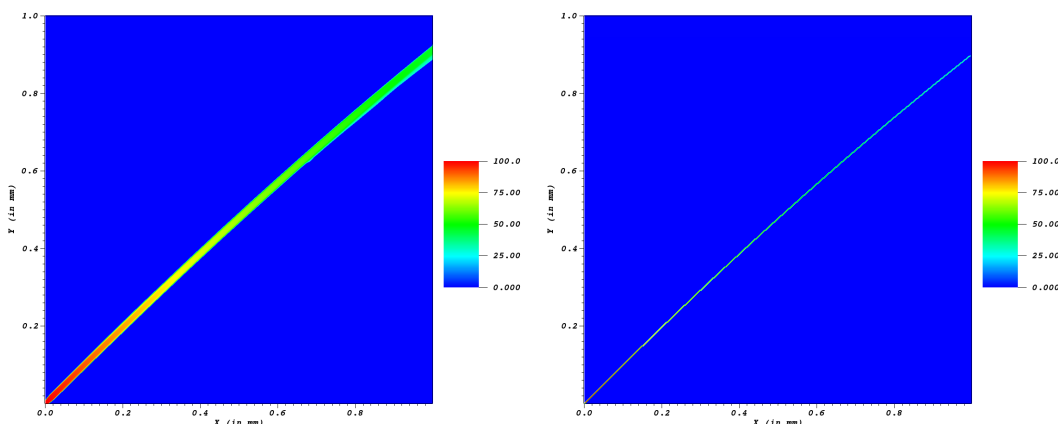


FIGURE 3.16 – Champ de vitesse verticale. Comparaison entre la solution Eulérienne (à gauche) et la solution Lagrangienne de référence (à droite)

référence s'écrit :

$$\frac{d d_{ref}}{d t} = \frac{-2 \lambda_f N u^* (T_f - T)}{d_{ref} \rho_p L v (T_{eb})} \frac{\ln(1 + B_T)}{B_T} \quad (3.110)$$

où nous renvoyons au chapitre 2 (partie 2.1.2.1, page 51) pour la définition des notations.

La figure 3.17 montre l'évolution du diamètre en fonction de la position x calculée par chacune des deux méthodes. Nous constatons un parfait accord entre les deux solutions ce qui permet de conclure cette première étape de validation.

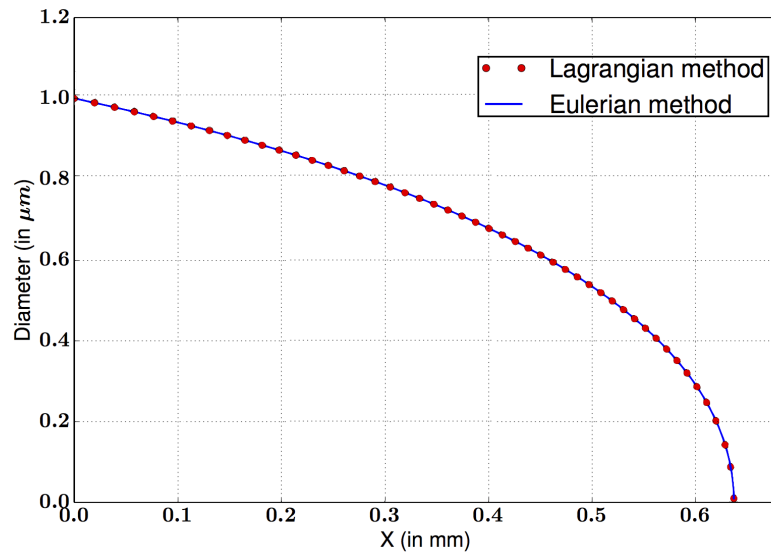


FIGURE 3.17 – Évolution du diamètre en fonction de x . Comparaison entre la solution Eulérienne et la solution Lagrangienne de référence

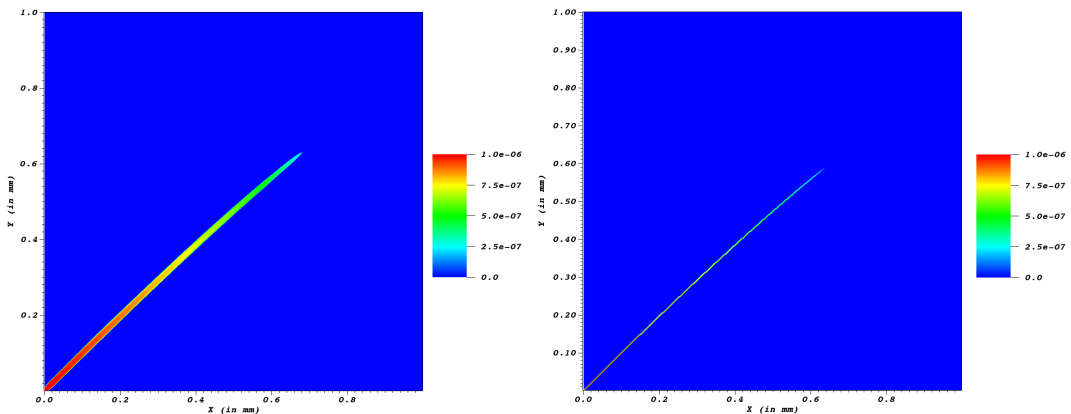


FIGURE 3.18 – Champ de diamètre. Comparaison entre la solution Eulérienne (à gauche) et la solution Lagrangienne de référence (à droite)

3.2.2 Cas d'épreuve #2 : Validation du traitement numérique du système complet

3.2.2.1 Présentation du cas test et des hypothèses de calcul

Pour valider le système couplé, nous avons créé un deuxième cas test. Des particules de diamètre $100\mu m$ sont injectées dans un tube de longueur L en déséquilibre thermodynamique avec le fluide. Le tube est choisi suffisamment long de sorte que si les effets thermiques sont pris en compte, les particules soient totalement évaporées en sortie, et qu'elles soient à l'équilibre dynamique avec le fluide sinon. L'écoulement du fluide est

supposé supersonique de sorte qu'il n'est pas nécessaire d'imposer de condition limite en sortie. De plus, le fluide est supposé parfait, il n'y a donc pas de phénomène de perte charge dû aux frottements le long de la paroi.

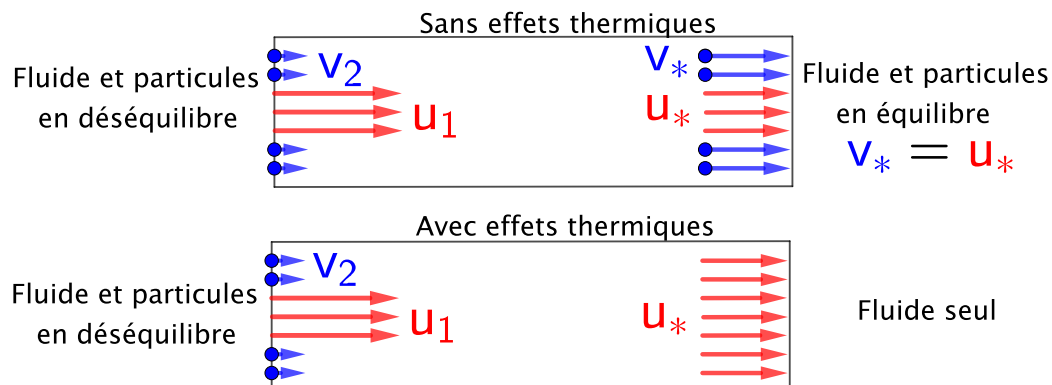


FIGURE 3.19 – Présentation du deuxième cas test de validation : particules (en bleu) et fluide (en rouge) en déséquilibre à l'entrée du tube et en équilibre à la sortie

Les particules ayant toutes le même diamètre, nous ne considérerons qu'une seule classe de particules. Nous utiliserons les notations suivantes :

- la densité du fluide sera notée ρ_1 ,
- la concentration massique des particules, correspondant à la valeur nm , sera notée ρ_2 ,
- la vitesse du fluide sera notée u_1 ,
- la vitesse des particules sera notée v_2 ,
- la pression du fluide sera notée p_1 ,
- la température du fluide sera notée T_1 , son énergie interne e_1 ,
- la température des particules sera notée T_2 .

De plus pour simplifier les calculs, nous ferons les hypothèses suivantes :

- l'écoulement est supposé mono-dimensionnel ($\mathbf{v} = (V_x, 0, 0)^t$) et $\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial z} = 0$,
- le fluide se comporte comme un gaz parfait avec γ constant,
- la température des particules ne varie pas,
- nous cherchons des solutions stationnaires au problème,
- les temps caractéristiques τ_{th} et τ_{dy} sont supposés constants.

3.2.2.2 Équations du système couplé {fluide+particules}

Notons τ_{dy} et τ_{th} les temps de relaxation dynamique et thermique déjà définis précédemment (cf. partie 3.1.2.2 page 94 pour la définition de τ_{dy} et partie 2.1.2.4 page 55 pour la définition de τ_{th}). A l'état stationnaire ($\frac{\partial}{\partial t} = 0$), avec les notations introduites ci-dessus, le système couplé s'écrit :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} (\rho_1 u_1) = \frac{\rho_2}{\tau_{th}} \\ \frac{\partial}{\partial x} (\rho_2 v_2) = -\frac{\rho_2}{\tau_{th}} \\ \frac{\partial}{\partial x} (\rho_1 u_1^2 + p_1) = \frac{\rho_2}{\tau_{dy}} (v_2 - u_1) + \frac{\rho_2 v_2}{\tau_{th}} \\ \frac{\partial}{\partial x} (\rho_2 v_2^2) = -\frac{\rho_2}{\tau_{dy}} (v_2 - u_1) - \frac{\rho_2 v_2}{\tau_{th}} \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho_1 u_1 \left(e_1 + \frac{u_1^2}{2} \right) + p_1 u_1 \right) = \frac{\rho_2 (v_2 - u_1) v_2}{\tau_{dy}} + \frac{\rho_2}{\tau_{th}} \left(e_2 + \frac{v_2^2}{2} \right) \end{cases} \quad (3.111)$$

Ces équations correspondent aux équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie du fluide (l'énergie interne des particules étant supposée constante).

Afin de simplifier le problème, nous supposons que l'énergie interne des particules est négligeable devant leur énergie cinétique ($e_2 \ll \frac{v_2^2}{2}$). L'objectif étant de valider l'implémentation numérique de la méthode de couplage, cette hypothèse n'est pas restrictive. L'équation d'énergie devient alors :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho_1 u_1 \left(e_1 + \frac{u_1^2}{2} \right) + p_1 u_1 \right) = \frac{\rho_2 (v_2 - u_1) v_2}{\tau_{dy}} + \frac{\rho_2}{\tau_{th}} \left(\frac{v_2^2}{2} \right) \quad (3.112)$$

et le système complet s'écrit finalement sous la forme :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} (\rho_1 u_1) = \frac{\rho_2}{\tau_{th}} \\ \frac{\partial}{\partial x} (\rho_2 v_2) = -\frac{\rho_2}{\tau_{th}} \\ \frac{\partial}{\partial x} (\rho_1 u_1^2 + p_1) = \frac{\rho_2}{\tau_{dy}} (v_2 - u_1) + \frac{\rho_2 v_2}{\tau_{th}} \\ \frac{\partial}{\partial x} (\rho_2 v_2^2) = -\frac{\rho_2}{\tau_{dy}} (v_2 - u_1) - \frac{\rho_2 v_2}{\tau_{th}} \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho_1 u_1 \left(e_1 + \frac{u_1^2}{2} \right) + p_1 u_1 \right) = \frac{\rho_2 (v_2 - u_1) v_2}{\tau_{dy}} + \frac{\rho_2}{\tau_{th}} \left(\frac{v_2^2}{2} \right) \end{cases} \quad (3.113)$$

Le calcul d'une solution explicite pour le système (3.113) n'est pas faisable. Il est néanmoins possible de calculer exactement les bilans globaux sur le tube, *ie* d'exprimer les grandeurs en sortie en fonction des grandeurs en entrée. Ces bilans sont exacts mais ne prennent pas en compte l'évolution au sein du tube. Pour accéder à cette évolution, il est possible de linéariser le système autour d'une solution d'équilibre et de calculer la solution exacte du système linéarisé. Cette solution est une bonne approximation de (3.113) si les variables évoluent dans un domaine proche de l'état d'équilibre.

3.2.2.3 Validation de la conservativité globale : calcul des conditions de sortie en fonction des conditions d'entrée

Étude du cas simplifié dans lequel les phénomènes thermiques ne sont pas pris en compte Commençons, dans un premier temps, par le cas où les particules ne subissent aucun effet thermique. Les équations de conservation (masses, quantité de mouvement et énergie) permettent de calculer les conditions de sortie, indicées s , en fonction des conditions d'entrée, indicées e . Comme le tube est supposé suffisamment long, les vitesses des deux phases sont égales à la sortie de celui-ci. Cette vitesse commune en sortie est notée u^s .

Équations de conservation de la masse

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \rho_1 u_1 &= 0 \Rightarrow \rho_1^e u_1^e = \rho_1^s u^s \\ \frac{\partial}{\partial x} \rho_2 v_2 &= 0 \Rightarrow \rho_2^e v_2^e = \rho_2^s u^s \end{aligned} \quad (3.114)$$

Équation de conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial}{\partial x} (\rho_1 u_1^2 + p_1 + \rho_2 v_2^2) = 0 \Rightarrow \rho_1^e (u_1^e)^2 + \rho_2 (v_2^e)^2 + p_1^e = (\rho_1^s + \rho_2^s) (u^s)^2 + p_1^s \quad (3.115)$$

Équation de conservation de l'énergie

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho_1 u_1 \left(e_1 + \frac{u_1^2}{2} \right) + p_1 u_1 + \rho_2 v_2 \left(\frac{v_2^2}{2} \right) \right) = 0 \quad (3.116)$$

L'hypothèse de gaz parfait permet d'exprimer l'énergie interne e_1 en fonction de la pression p_1 et de la densité ρ_1 :

$$e_1 = \frac{p_1}{(\gamma - 1) \rho_1} \quad (3.117)$$

L'équation de conservation de l'énergie peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(p_1 u_1 \frac{\gamma}{\gamma-1} + \rho_1 \frac{u_1^3}{2} + \rho_2 \frac{v_2^2}{2} \right) &= 0 \\ \Rightarrow p_1^e u_1^e \frac{\gamma}{\gamma-1} + \rho_1^e \frac{(u_1^e)^3}{2} + \rho_2^e \frac{(v_2^e)^3}{2} &= p_1^s u^s \frac{\gamma}{\gamma-1} + \frac{(u^s)^3}{2} (\rho_1^s + \rho_2^s) \end{aligned} \quad (3.118)$$

Le système à résoudre comporte 4 équations et 4 inconnues $(\rho_1^s, \rho_2^s, p^s, u^s)$:

$$\begin{cases} \rho_1^e u_1^e = \rho_1^s u^s \\ \rho_2^e v_2^e = \rho_2^s u^s \\ \rho_1^e (u_1^e)^2 + \rho_2^e (v_2^e)^2 + p_1^e = (\rho_1^s + \rho_2^s) (u^s)^2 + p_1^s \\ p_1^e u_1^e \frac{\gamma}{\gamma-1} + \rho_1^e \frac{(u_1^e)^3}{2} + \rho_2^e \frac{(v_2^e)^3}{2} = p_1^s u^s \frac{\gamma}{\gamma-1} + \frac{(u^s)^3}{2} (\rho_1^s + \rho_2^s) \end{cases} \quad (3.119)$$

Il peut être résolu à l'aide d'un point fixe. Dans le tableau ci-dessous (cf. Tableau 3.4) nous comparons les résultats obtenus par résolution du système (3.119) aux valeurs fournies par le code :

Conditions d'entrée		
u_1^e	966 m.s^{-1}	
u_2^e	950 m.s^{-1}	
ρ_1^e	1.2 kg.m^{-3}	
ρ_2^e	0.1 kg.m^{-3}	
p_1^e	200000 Pa	
Conditions de sortie		
Quantité	Théorie	Code
u^s	964 m.s^{-1}	964 m.s^{-1}
ρ_1^s	1.2019 kg.m^{-3}	1.2019 kg.m^{-3}
ρ_2^s	0.0985 kg.m^{-3}	0.0985 kg.m^{-3}
p_1^s	200468 Pa	200468 Pa

TABLE 3.4 – Calcul des conditions de sortie : comparaison entre les solutions théoriques et les résultats du code

L'excellente concordance entre les deux résultats permet d'affirmer que le code vérifie, en l'absence d'effets thermiques, les principes de conservation de la masse, quantité de mouvement et énergie.

Étude du cas complet prenant en compte les effets dynamiques et thermiques

Nous pouvons maintenant aborder le cas complet comprenant les effets dynamiques et les effets thermiques. Le tube est supposé suffisamment long de sorte qu'en sortie les particules sont totalement évaporées. Les équations de conservation deviennent :

Équation de conservation de la masse

$$\frac{\partial}{\partial x} (\rho_1 u_1 + \rho_2 v_2) = 0 \Rightarrow \rho_1^e u_1^e + \rho_2^e v_2^e = \rho_1^s u^s \quad (3.120)$$

Équation de conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial}{\partial x} (\rho_1 u_1^2 + p_1 + \rho_2 v_2^2) = 0 \Rightarrow \rho_1^e (u_1^e)^2 + \rho_2^e (v_2^e)^2 + p_1^e = \rho_1^s (u^s)^2 + p_1^s \quad (3.121)$$

Équation de conservation de l'énergie du mélange fluide + particules sous l'hypothèse $|e_2| \ll v_2^2/2$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(p_1 u_1 \frac{\gamma}{\gamma-1} + \rho_1 \frac{u_1^3}{2} + \rho_2 \frac{v_2^3}{2} \right) &= 0 \\ \Rightarrow p_1^e u_1^e \frac{\gamma}{\gamma-1} + \frac{\rho_1^e (u_1^e)^3}{2} + \frac{\rho_2^e (v_2^e)^3}{2} &= p_1^s u^s \frac{\gamma}{\gamma-1} + \frac{\rho_1^s (u^s)^3}{2} \end{aligned} \quad (3.122)$$

Le système à résoudre comporte donc 3 équations et 3 inconnues (ρ_1^s, p^s, u^s) :

$$\begin{cases} \rho_1^e u_1^e + \rho_2^e v_2^e = \rho_1^s u^s \\ \rho_1^e (u_1^e)^2 + \rho_2^e (v_2^e)^2 + p_1^e = \rho_1^s (u^s)^2 + p_1^s \\ p_1^e u_1^e \frac{\gamma}{\gamma-1} + \frac{\rho_1^e (u_1^e)^3}{2} + \frac{\rho_2^e (v_2^e)^3}{2} = p_1^s u^s \frac{\gamma}{\gamma-1} + \frac{\rho_1^s (u^s)^3}{2} \end{cases} \quad (3.123)$$

De la même manière, une méthode du point fixe est utilisée pour résoudre (3.123). Les résultats obtenus par les deux méthodes sont donnés dans le tableau 3.5. L'excellent accord permet d'affirmer que le code vérifie les principes de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie.

3.2.2.4 Validation du système global : linéarisation du système en l'absence d'effets thermiques, calcul de solutions explicites et comparaison avec les résultats obtenus par le code SDFS

Les différentes validations effectuées précédemment permettent de s'assurer que le comportement global du code est bon et que celui-ci vérifie les principes de conservation de

Conditions d'entrée		
u_1^e	966 $m.s^{-1}$	
v_2^e	917 $m.s^{-1}$	
ρ_1^e	1.2 $kg.m^{-3}$	
ρ_2^e	0.1 $kg.m^{-3}$	
p_1^e	200000 Pa	
Conditions de sortie		
Quantité	Théorie	Code
u^s	961 $m.s^{-1}$	961 $m.s^{-1}$
ρ_1^s	1.3 $kg.m^{-3}$	1.3 $kg.m^{-3}$
ρ_2^s	0 $kg.m^{-3}$	0 $kg.m^{-3}$
p_1^s	201392 Pa	201392 Pa

TABLE 3.5 – Calcul des conditions de sortie : comparaison entre les solutions théoriques et les résultats du code

la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie. Néanmoins, elles ne permettent pas de valider la dynamique des échanges entre les deux phases entre l'entrée et la sortie du tube. Dans cette partie, nous allons linéariser le système autour d'une solution d'équilibre, ce qui permettra ensuite d'obtenir une solution explicite le long du tube.

Dans un premier temps, nous commençons par écrire le système couplé en fonction des variables ρ_1 , ρ_2 , u_1 , v_2 et p_1 . Le système devient (cf. Annexe 1 pour plus de détails) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial x} (\rho_1 u_1) = \frac{\rho_2}{\tau_{th}} \\ \frac{\partial}{\partial x} (\rho_2 v_2) = -\frac{\rho_2}{\tau_{th}} \\ \frac{\partial}{\partial x} (\rho_1 u_1^2 + p_1) = \frac{\rho_2}{\tau_{dy}} (v_2 - u_1) + \frac{\rho_2 v_2}{\tau_{th}} \\ \frac{\partial}{\partial x} (\rho_2 v_2^2) = -\frac{\rho_2}{\tau_{dy}} (v_2 - u_1) - \frac{\rho_2 v_2}{\tau_{th}} \\ \frac{\gamma}{\gamma - 1} p_1 \frac{\partial}{\partial x} u_1 + \frac{1}{\gamma - 1} u_1 \frac{\partial}{\partial x} p_1 = \rho_2 (v_2 - u_1)^2 \left(\frac{1}{\tau_{dy}} + \frac{1}{2\tau_{th}} \right) \end{array} \right. \quad (3.124)$$

Linéarisons maintenant le système autour d'un état d'équilibre $(\rho_{10}, \rho_{20}, u_0, p_{10})^t$. Pour les vitesses, cela revient à supposer que u_1 et v_2 sont proches de u_0 et qu'il est possible de les écrire sous la forme suivante :

$$u_1 = u_0 + \widehat{u}_1 \quad v_2 = u_0 + \widehat{v}_2 \quad (3.125)$$

\widehat{u}_1 et \widehat{u}_1 représentent les variations autour de la vitesse u_0 . De même pour les autres variables :

$$\rho_1 = \rho_{10} + \widehat{\rho}_1 \quad \rho_2 = \rho_{20} + \widehat{\rho}_2 \quad (3.126)$$

$$p_1 = p_{10} + \widehat{p}_1 \quad (3.127)$$

Sans perte de généralité, les fluctuations sont supposées nulles à l'origine du tube :

$$\widehat{\rho}_1(x=0) = 0 \quad \widehat{\rho}_2(x=0) = 0 \quad \widehat{p}_1(x=0) = 0 \quad (3.128)$$

Le système linéarisé s'écrit sous la forme suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} u_0 \frac{\partial}{\partial x} \widehat{\rho}_1 + \rho_{10} \frac{\partial}{\partial x} \widehat{u}_1 = \frac{\rho_{20} + \widehat{\rho}_2}{\tau_{th}} \\ u_0 \frac{\partial}{\partial x} \widehat{\rho}_2 + \rho_{20} \frac{\partial}{\partial x} \widehat{v}_2 = -\frac{\rho_{20} + \widehat{\rho}_2}{\tau_{th}} \\ u_0^2 \frac{\partial}{\partial x} \widehat{\rho}_1 + 2 \rho_{10} u_0 \frac{\partial}{\partial x} \widehat{u}_1 + \frac{\partial}{\partial x} \widehat{p}_1 = \frac{\rho_{20}}{\tau_{dy}} (\widehat{v}_2 - \widehat{u}_1) + \frac{(\rho_{20} + \widehat{\rho}_2) u_0 + \rho_{20} \widehat{v}_2}{\tau_{th}} \\ u_0^2 \frac{\partial}{\partial x} \widehat{\rho}_2 + 2 \rho_{20} u_0 \frac{\partial}{\partial x} \widehat{v}_2 = -\frac{\rho_{20}}{\tau_{dy}} (\widehat{v}_2 - \widehat{u}_1) - \frac{(\rho_{20} + \widehat{\rho}_2) u_0 + \rho_{20} \widehat{v}_2}{\tau_{th}} \\ \frac{\partial}{\partial x} \widehat{p}_1 = -\frac{\gamma p_{10}}{u_0} \frac{\partial}{\partial x} \widehat{u}_1 \end{array} \right. \quad (3.129)$$

Comme il n'est pas possible de résoudre explicitement le système linéarisé complet (3.129) nous ne considérons dans la suite que les effets dynamiques (*ie* $\tau_{th} = +\infty$). Le système linéarisé dynamique est le suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} u_0 \frac{\partial}{\partial x} \widehat{\rho}_1 + \rho_{10} \frac{\partial}{\partial x} \widehat{u}_1 = 0 \end{array} \right. \quad (3.130a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} u_0 \frac{\partial}{\partial x} \widehat{\rho}_2 + \rho_{20} \frac{\partial}{\partial x} \widehat{u}_1 = 0 \end{array} \right. \quad (3.130b)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} u_0^2 \frac{\partial}{\partial x} \widehat{\rho}_1 + 2 \rho_{10} u_0 \frac{\partial}{\partial x} \widehat{u}_1 + \frac{\partial}{\partial x} \widehat{p}_1 = \frac{\rho_{20}}{\tau_{dy}} (\widehat{v}_2 - \widehat{u}_1) \end{array} \right. \quad (3.130c)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} u_0^2 \frac{\partial}{\partial x} \widehat{\rho}_2 + 2 \rho_{20} u_0 \frac{\partial}{\partial x} \widehat{v}_2 = -\frac{\rho_{20}}{\tau_{dy}} (\widehat{v}_2 - \widehat{u}_1) \end{array} \right. \quad (3.130d)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial x} \widehat{p}_1 = -\frac{\gamma p_{10}}{u_0} \frac{\partial}{\partial x} \widehat{u}_1 \end{array} \right. \quad (3.130e)$$

Les équations (3.130a),(3.130b),(3.130e) permettent d'exprimer toutes les quantités en fonction des vitesses :

$$\frac{\partial}{\partial x} \widehat{\rho}_1 = -\frac{\rho_{10}}{u_0} \frac{\partial}{\partial x} \widehat{u}_1 \quad (3.131)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \widehat{\rho}_2 = -\frac{\rho_{20}}{u_0} \frac{\partial}{\partial x} \widehat{v}_2 \quad (3.132)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \widehat{p}_1 = -\frac{\gamma p_{10}}{u_0} \frac{\partial}{\partial x} \widehat{u}_1 \quad (3.133)$$

Nous pouvons donc réécrire l'équation (3.130c) :

$$-u_0 \rho_{10} \frac{\partial}{\partial x} \widehat{u}_1 + 2 \rho_{10} u_0 \frac{\partial}{\partial x} \widehat{u}_1 - \frac{\gamma p_{10}}{u_0} \frac{\partial}{\partial x} \widehat{u}_1 = \frac{\rho_{20}}{\tau_{dy}} (\widehat{v}_2 - \widehat{u}_1) \quad (3.134)$$

$$\left(\rho_{10} u_0 - \frac{\gamma p_{10}}{u_0} \right) \frac{\partial}{\partial x} \widehat{u}_1 = \frac{\rho_{20}}{\tau_{dy}} (\widehat{v}_2 - \widehat{u}_1) \quad (3.135)$$

Introduisons c la vitesse du son dans le fluide à l'équilibre et M le nombre de Mach à l'équilibre. Nous avons les relations suivantes :

$$c^2 = \frac{\gamma p_{10}}{\rho_{10}} \quad M = \frac{u_0}{c} \quad (3.136)$$

L'équation (3.134) devient :

$$\left(\rho_{10} u_0 - \frac{\rho_{10} c^2}{u_0} \right) \frac{\partial}{\partial x} \widehat{u}_1 = \frac{\rho_{20}}{\tau_{dy}} (\widehat{v}_2 - \widehat{u}_1) \quad (3.137)$$

$$(\rho_{10} u_0) \left(1 - \frac{1}{M^2} \right) \frac{\partial}{\partial x} \widehat{u}_1 = \frac{\rho_{20}}{\tau_{dy}} (\widehat{v}_2 - \widehat{u}_1) \quad (3.138)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \widehat{u}_1 = \frac{\rho_{20}}{\rho_{10}} \frac{1}{\tau_{dy} u_0} \frac{M^2}{M^2 - 1} (\widehat{v}_2 - \widehat{u}_1) \quad (3.139)$$

De même pour l'équation (3.130d) :

$$(\rho_{20} u_0) \frac{\partial}{\partial x} \widehat{v}_2 = -\frac{\rho_{20}}{\tau_{dy}} (\widehat{v}_2 - \widehat{u}_1) \quad (3.140)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \widehat{v}_2 = -\frac{1}{\tau_{dy} u_0} (\widehat{v}_2 - \widehat{u}_1) \quad (3.141)$$

Ce qui donne en utilisant (3.139) et (3.141) :

$$\frac{\partial}{\partial x} (\widehat{v}_2 - \widehat{u}_1) = -\frac{1}{\tau_{dy} u_0} \left(1 + \frac{\rho_{20}}{\rho_{10}} \frac{M^2}{M^2 - 1} \right) (\widehat{v}_2 - \widehat{u}_1) \quad (3.142)$$

Introduisons la constante :

$$C_1 = \frac{1}{\tau_{dy} u_0} \left(1 + \frac{\rho_{20}}{\rho_{10}} \frac{M^2}{M^2 - 1} \right) \quad (3.143)$$

(3.142) devient :

$$\frac{\partial}{\partial x} (\widehat{v}_2 - \widehat{u}_1) = -C_1 (\widehat{v}_2 - \widehat{u}_1) \quad (3.144)$$

La résolution de l'équation différentielle (3.144) donne :

$$\widehat{v}_2(x) - \widehat{u}_1(x) = (\widehat{v}_2(0) - \widehat{u}_1(0)) e^{-C_1 x} \quad (3.145)$$

Nous remarquons que pour $M > 1$ nous avons $C_1 < 0$ ce qui permet de conclure que les vitesses s'équilibrent lorsque $x \rightarrow +\infty$ ($x = L$ dans la pratique) :

$$M > 1 \Rightarrow \lim_{x \rightarrow +\infty} \widehat{v}_2(x) - \widehat{u}_1(x) = 0 \quad (3.146)$$

Reprenons maintenant l'équation (3.141) :

$$\frac{\partial}{\partial x} \widehat{v}_2 = -\frac{\widehat{v}_2(0) - \widehat{u}_1(0)}{\tau_{dy} u_0} e^{-C_1 x} \quad (3.147)$$

$$\widehat{v}_2 = \widehat{v}_2(0) - \frac{1}{C_1} \frac{\widehat{v}_2(0) - \widehat{u}_1(0)}{\tau_{dy} u_0} (1 - e^{-C_1 x}) \quad (3.148)$$

Les équations (3.145) et (3.148) permettent d'obtenir l'expression de \widehat{u}_1 :

$$\begin{aligned} \widehat{u}_1 &= -(\widehat{v}_2(0) - \widehat{u}_1(0)) e^{-C_1 x} + \widehat{v}_2(0) - \frac{1}{C_1} \frac{\widehat{v}_2(0) - \widehat{u}_1(0)}{\tau_{dy} u_0} (1 - e^{-C_1 x}) \\ &= \widehat{u}_1(0) + (\widehat{v}_2(0) - \widehat{u}_1(0)) \left(1 - \frac{1}{C_1 \tau_{dy} u_0} \right) (1 - e^{-C_1 x}) \end{aligned} \quad (3.149)$$

Il est maintenant possible de calculer les inconnues $\widehat{\rho}_1$, $\widehat{\rho}_2$ et \widehat{p}_1 .

Densité $\widehat{\rho}_1$ (en combinant les équations (3.130a), (3.139) et (3.145)) :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial x} \widehat{\rho}_1 &= -\frac{\rho_{10}}{u_0} \frac{\partial}{\partial x} \widehat{u}_1 \\
 &= -\frac{\rho_{10}}{u_0} \frac{\rho_{20}}{\rho_{10}} \frac{1}{\tau_{dy} u_0} \frac{M^2}{M^2 - 1} (\widehat{v}_2 - \widehat{u}_1) \\
 &= -\frac{\rho_{20}}{u_0^2 \tau_{dy}} \frac{M^2}{M^2 - 1} (\widehat{v}_2(0) - \widehat{u}_1(0)) e^{-C_1 x}
 \end{aligned} \tag{3.150}$$

Soit encore :

$$\widehat{\rho}_1 = -\frac{\rho_{20}}{C_1 u_0^2 \tau_{dy}} \frac{M^2}{M^2 - 1} (\widehat{v}_2(0) - \widehat{u}_1(0)) (1 - e^{-C_1 x}) \tag{3.151}$$

Densité $\widehat{\rho}_2$:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial x} \widehat{\rho}_2 &= -\frac{\rho_{20}}{u_0} \frac{\partial}{\partial x} \widehat{v}_2 \\
 &= \frac{\rho_{20}}{u_0} \frac{1}{\tau_{dy} u_0} (\widehat{v}_2 - \widehat{u}_1) \\
 &= \frac{\rho_{20}}{u_0^2 \tau_{dy}} (\widehat{v}_2(0) - \widehat{u}_1(0)) e^{-C_1 x}
 \end{aligned} \tag{3.152}$$

D'où l'expression de $\widehat{\rho}_2$:

$$\widehat{\rho}_2 = \frac{\rho_{20}}{C_1 u_0^2 \tau_{dy}} (\widehat{v}_2(0) - \widehat{u}_1(0)) (1 - e^{-C_1 x}) \tag{3.153}$$

Pression \widehat{p}_1 : L'équation (3.130e) devient :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial x} \widehat{p}_1 &= -\frac{\gamma p_{10}}{u_0} \frac{\partial}{\partial x} \widehat{u}_1 \\
 &= -\frac{\gamma p_{10}}{u_0} \frac{\rho_{20}}{\rho_{10}} \frac{1}{\tau_{dy} u_0} \frac{M^2}{M^2 - 1} (\widehat{v}_2 - \widehat{u}_1) \\
 &= -\frac{\gamma p_{10} \rho_{20}}{\rho_{10} \tau_{dy} U u_0^2} \frac{M^2}{M^2 - 1} (\widehat{v}_2(0) - \widehat{u}_1(0)) e^{-C_1 x}
 \end{aligned} \tag{3.154}$$

Le terme de pression \widehat{p}_1 vaut donc :

$$\widehat{p}_1 = -\frac{\gamma p_{10} \rho_{20}}{\rho_{10} \tau_{dy} u_0^2 C_1} \frac{M^2}{M^2 - 1} (1 - e^{-C_1 x}) \tag{3.155}$$

En introduisant ϵ le chargement massique en particules :

$$\epsilon = \frac{\rho_{20}}{\rho_{10}} \tag{3.156}$$

Le système linéarisé admet donc la solution explicite suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{\rho}_1 = -\frac{\rho_{20}}{u_0} \frac{M^2}{M^2 - 1 + \epsilon M^2} (\hat{v}_2(0) - \hat{u}_1(0)) \left[1 - \exp\left(\frac{-x}{\tau_{dy} u_0} \left(1 + \epsilon \frac{M^2}{M^2 - 1}\right)\right) \right] \\ \hat{\rho}_2 = \frac{\rho_{20}}{u_0} \frac{M^2 - 1}{M^2 - 1 + \epsilon M^2} (\hat{v}_2(0) - \hat{u}_1(0)) \left[1 - \exp\left(\frac{-x}{\tau_{dy} u_0} \left(1 + \epsilon \frac{M^2}{M^2 - 1}\right)\right) \right] \\ \hat{u}_1 = \hat{u}_1(0) + \frac{\epsilon M^2}{M^2 - 1 + \epsilon M^2} (\hat{v}_2(0) - \hat{u}_1(0)) \left[1 - \exp\left(\frac{-x}{\tau_{dy} u_0} \left(1 + \epsilon \frac{M^2}{M^2 - 1}\right)\right) \right] \\ \hat{v}_2 = \hat{v}_2(0) - \frac{M^2 - 1}{M^2 - 1 + \epsilon M^2} (\hat{v}_2(0) - \hat{u}_1(0)) \left[1 - \exp\left(\frac{-x}{\tau_{dy} u_0} \left(1 + \epsilon \frac{M^2}{M^2 - 1}\right)\right) \right] \\ \hat{p}_1 = -\frac{\gamma p_{10} \epsilon}{u_0} \frac{M^2}{M^2 - 1 + \epsilon M^2} \left[1 - \exp\left(\frac{-x}{\tau_{dy} u_0} \left(1 + \epsilon \frac{M^2}{M^2 - 1}\right)\right) \right] \end{array} \right. \quad (3.157)$$

Nous traçons ci-dessous les solutions du système linéarisé (représentées par des cercles), les résultats fournis par le code SDFS (en trait plein), ainsi que le comportement asymptotique (en pointillé) issu du calcul d'équilibre global entrée-sortie. Les conditions d'entrée du calcul sont récapitulées dans le tableau ci-dessous (cf. Tableau 3.6) :

u_1^e	966 $m.s^{-1}$
u_2^e	950 $m.s^{-1}$
ρ_1^e	1.2 $kg.m^{-3}$
ρ_2^e	0.1 $kg.m^{-3}$
p_1^e	200000 Pa

TABLE 3.6 – Conditions entrée de la simulation

La figure 3.20 représente l'évolution des densités $\hat{\rho}_1$ et $\hat{\rho}_2$ le long du tube, la figure 3.21 celle des vitesses \hat{u}_1 et \hat{v}_1 et la figure 3.22 celle de la pression \hat{p}_1 .

L'excellent accord des résultats fournis par le code SDFS avec, d'une part les solutions du système linéarisé et, d'autre part, les conditions de sortie théoriques, permet de valider les méthodes numériques utilisées pour le système {fluide + particules + termes sources} en l'absence de phénomènes thermiques. Avant de nous intéresser à ces phénomènes, nous traçons ci-dessous l'évolution de la vitesse des deux phases lorsque l'écart entre les vitesses entrée est plus important. Le tableau ci-dessous (cf. Tableau 3.7) récapitule les nouvelles conditions entrée.

La figure 3.23 représente l'évolution des vitesses en fonction de la position x . Comme attendu, les résultats issus du système linéarisé et ceux issus du code ne sont plus en accord. En effet, les vitesses étant maintenant plus éloignées de l'état d'équilibre u_0 , le système linéarisé devient faux. Par contre, la solution donnée par le code SDFS est bien compatible avec la solution théorique issue du calcul traduisant la conservation globale

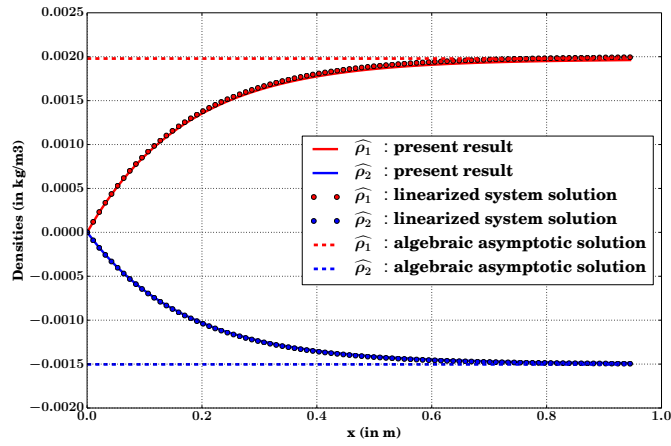


FIGURE 3.20 – Évolution des densités en fonction de la position

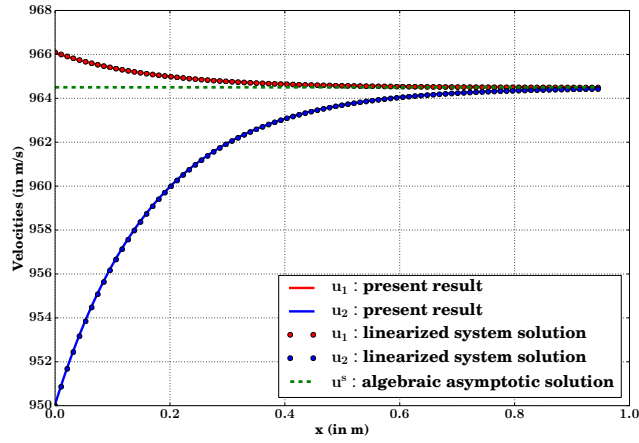


FIGURE 3.21 – Évolution des vitesses en fonction de la position

u_1^e	966 m.s^{-1}
u_2^e	800 m.s^{-1}
ρ_1^e	1.2 kg.m^{-3}
ρ_2^e	0.1 kg.m^{-3}
p_1^e	200000 Pa

TABLE 3.7 – Conditions entrée de la simulation

de la masse, quantité de mouvement et énergie du système couplé entre l'entrée et la sortie.

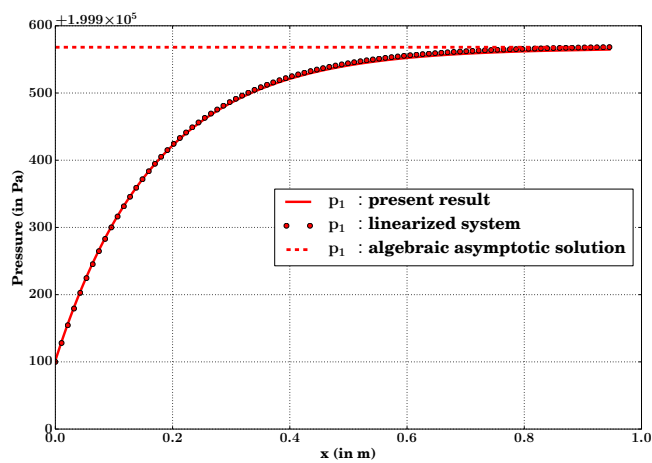


FIGURE 3.22 – Évolution de la pression en fonction de la position

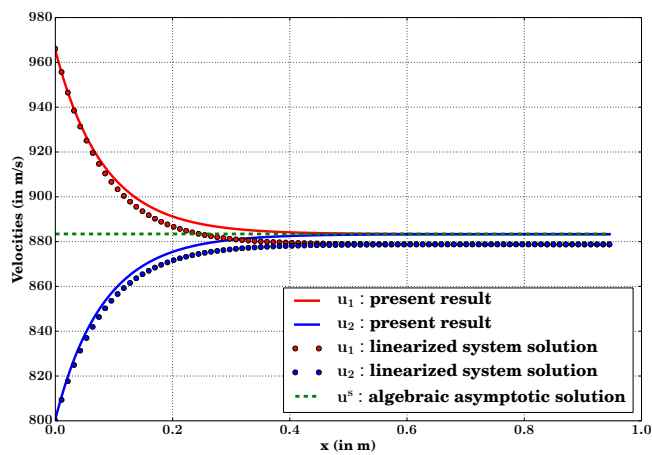


FIGURE 3.23 – Évolution des vitesses en fonction de la position

3.2.2.5 Validation du système global : calcul de solutions explicites du système en l'absence d'effets dynamiques et comparaison avec les résultats obtenus par le code SDFS

Pour finir nous allons étudier le comportement du système complet lorsque les effets thermiques sont pris en compte et les effets dynamiques négligés. Le système couplé

devient alors :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} (\rho_1 u_1) = \frac{\rho_2}{\tau_{th}} \\ \frac{\partial}{\partial x} (\rho_2 v_2) = -\frac{\rho_2}{\tau_{th}} \\ \frac{\partial}{\partial x} (\rho_1 u_1^2 + p_1) = \frac{\rho_2 v_2}{\tau_{th}} \\ \frac{\partial}{\partial x} (\rho_2 v_2^2) = -\frac{\rho_2 v_2}{\tau_{th}} \\ \frac{\gamma}{\gamma-1} p_1 \frac{\partial}{\partial x} u_1 + \frac{1}{\gamma-1} u_1 \frac{\partial}{\partial x} p_1 = \frac{\rho_2 (v_2 - u_1)^2}{2\tau_{th}} \end{cases} \quad (3.158)$$

L'absence d'effets dynamiques impose que les vitesses soient égales. Notons u cette vitesse unique $u_1 = v_2 = u$. Le système d'équations (3.158) devient alors :

$$\begin{cases} u \frac{\partial}{\partial x} \rho_1 = \frac{\rho_2}{\tau_{th}} \\ u \frac{\partial}{\partial x} \rho_2 = -\frac{\rho_2}{\tau_{th}} \\ u^2 \frac{\partial}{\partial x} \rho_1 + \frac{\partial}{\partial x} p_1 = \frac{\rho_2 u}{\tau_{th}} \end{cases} \quad (3.159)$$

Ce système admet la solution explicite suivante :

$$\begin{cases} \rho_1(x) = \rho_1(x=0) + \rho_2(x=0) \left(1 - \exp\left(\frac{-x}{\tau_{th}u}\right)\right) \\ \rho_2(x) = \rho_2(x=0) \exp\left(\frac{-x}{\tau_{th}u}\right) \\ p_1 = p_1(x=0) \end{cases} \quad (3.160)$$

Dans le tableau 3.8, les nouvelles conditions entrée du calcul sont détaillées :

u_1^e	966 m.s^{-1}
u_2^e	966 m.s^{-1}
ρ_1^e	$1,2 \text{ kg.m}^{-3}$
ρ_2^e	0.1 kg.m^{-3}
p_1^e	200000 Pa

TABLE 3.8 – Conditions entrée de la simulation

La figure 3.24 représente l'évolution des densités le long du tube. La encore, un très bon accord est obtenu entre les résultats fournis par le code SDFS et la solution théorique.

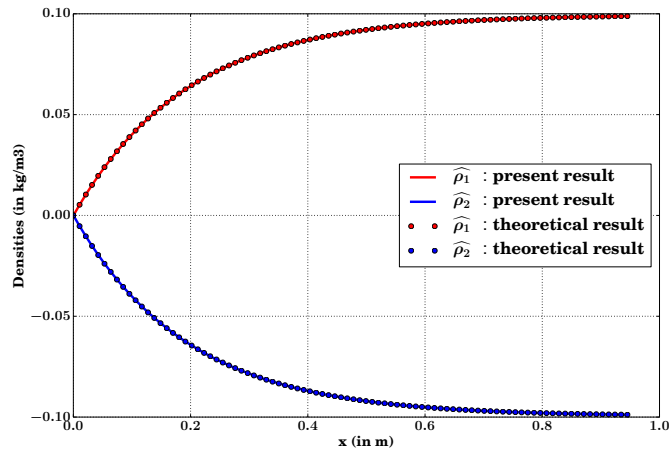


FIGURE 3.24 – Évolution des densités en fonction de la position

3.2.3 Validation de l'implémentation numérique des conditions aux limites d'interaction particules-paroi

Pour finir, nous présentons les résultats d'une dernière série de validation, celle de l'implémentation des conditions aux limites d'interaction particules-paroi. Dans le cas le plus général, plusieurs phénomènes entrent en considération pour traiter l'interaction particules-paroi (cf. partie 2.1.3 page 58) :

- le rebond des particules à la paroi,
- la fragmentation des particules lors de l'impact,
- l'érosion de la paroi,
- la diminution de vitesse à la paroi.

Pour valider ces différents aspects, nous considérons un écoulement { fluide + particules } autour d'un quart de sphère (cf. Fig. 3.25). Comme la vitesse lors de l'impact est connue (la même qu'à l'injection), il est possible de calculer la masse et la vitesse des particules après rebond. Le calcul de la masse étant directement lié à celui des vitesses, nous ne présentons que la validation du calcul des vitesses. Pour cela, notons \mathbf{n} le vecteur unitaire normal et \mathbf{t} le vecteur unitaire tangentiel à la paroi (cf. Fig. 3.25). Notons de plus \mathbf{v}_i le vecteur vitesse des particules qui impactent et \mathbf{v}_r le vecteur vitesse des particules émises à la paroi (*ie* les particules qui rebondissent).

En supposant un rebond spéculaire, nous avons les relations suivantes :

$$\begin{cases} \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{n} = -\mathbf{v}_r \cdot \mathbf{n} \\ \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{t} = \mathbf{v}_r \cdot \mathbf{t} \end{cases} \quad (3.161)$$

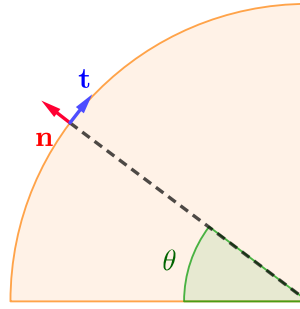
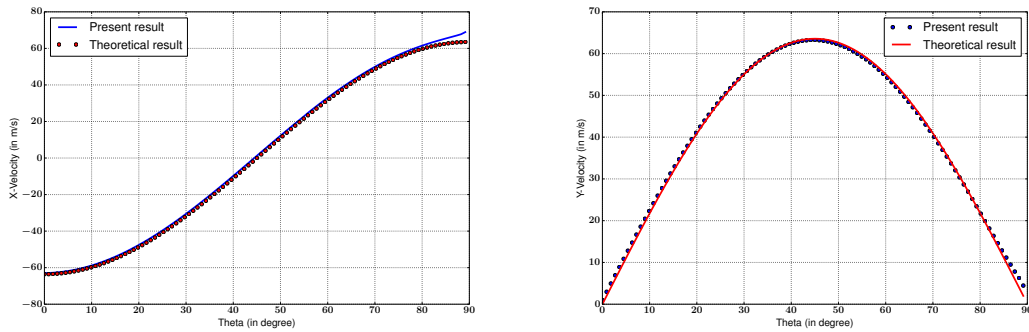


FIGURE 3.25 – Description de la géométrie utilisée

Il est alors possible de calculer les composantes horizontale et verticale de la vitesse \mathbf{v}_r :

$$\begin{cases} v_r^x = -v_i^x (n_x^2 - n_y^2) + 2 v_i^y n_x n_y \\ v_r^y = -v_i^y (n_x^2 - n_y^2) + 2 v_i^x n_x n_y \end{cases} \quad (3.162)$$

Sur la figure 3.26, nous représentons l'évolution des vitesses v_r^x et v_r^y en fonction de l'angle θ :


 FIGURE 3.26 – Évolution des vitesses après rebond en fonction de l'angle θ : comparaison entre les résultats du code et la solution théorique

Les particules sont émises à la paroi avec les bonnes vitesses, ce qui conclut la validation de l'implémentation de l'interaction particules-paroi.

Chapitre 4

Modélisation de la fragmentation de particules liquides

Sommaire

Nomenclature du chapitre 4	136
4.1 Description de deux modèles de fragmentation adaptés au régime supersonique	139
4.1.1 Description du modèle de fragmentation proposé par Reinecke	140
4.1.2 Description du modèle de fragmentation de Chauvin	149
4.2 Mise en évidence de l'importance de la fragmentation dans la caractérisation d'un spray supersonique	156
4.2.1 Évaluation du temps caractéristique de fragmentation	156
4.2.2 Analyse des flux de masse impactant la paroi en fonction du modèle de fragmentation	157
4.3 Description des nouveaux modèles de fragmentation	160
4.3.1 Description du modèle de fragmentation dit "à deux classes" .	160
4.3.2 Description du modèle multiclassés	165
4.4 Conclusion	176

Nomenclature du chapitre 4

Lettres romanes		Unité
T_f	Température du fluide	K
\mathbf{u}_f	Vitesse du fluide	$m.s^{-1}$
$c_{p,p}$	Capacité thermique massique à pression constante	$m.s^{-2}.K^{-1}$
d	Diamètre de la (des) particule(s)	m
e	Energie interne par unité de masse de la (des) particule(s)	$m^2.s^{-2}$
m	Masse d'une particule	kg
n	Nombre de particules par unité de volume	m^{-3}
T	Température de la (des) particule(s)	K
\mathbf{v}	Vitesse de la (des) particule(s)	$m.s^{-1}$

Lettres grecques

ρ_f	Densité du fluide	$kg.m^{-3}$
ρ_p	Densité de la (des) particule(s)	$kg.m^{-3}$
σ_p	Tension superficielle de la (des) particule(s)	$kg.s^{-2}$
τ_{bk}	Temps caractéristique de fragmentation de Reinecke ou de Chauvin	s
τ_{ch}	Temps caractéristique de chauffage	s
τ_{dy}	Temps caractéristique des effets dynamiques	s
τ_{ev}	Temps caractéristique d'évaporation	s
τ_f	Temps caractéristique de la fragmentation de Chauvin	s
τ_{frag}	Temps caractéristique de fragmentation	s
τ_{Ra}	Temps de Rayleigh	s
τ_{rei}	Temps caractéristique de la fragmentation de Reinecke	s

Nombre sans dimension

C_D	Coefficient de traînée de la (des) particule(s)
Nu	Nombre de Nusselt
Oh	Nombre d'Ohnesorge
t^*	Temps de fragmentation adimensionné
We	Nombre de Weber
Ψ	Facteur de forme de la (des) particule(s)

Dans le chapitre précédent nous avons décrit les équations permettant de modéliser le comportement du brouillard en l'absence de fragmentation. Dans ce chapitre, nous allons étudier en détail ce phénomène et nous expliciterons les équations qui permettent de l'appréhender. Dans un premier temps, nous présenterons deux modèles issus de la littérature du phénomène de fragmentation. Dans un second temps, nous montrerons par des simulations numériques l'importance de la fragmentation sur le calcul du flux de masse à la paroi dans le cas d'un écoulement supersonique. Enfin, nous terminerons par la présentation de deux nouveaux modèles de fragmentation développés dans le cadre de la thèse, afin de pallier certaines carences des modèles existants : le premier basé sur une extension du modèle de Reinecke ; le second totalement nouveau, issu d'expériences réalisées à l'institut P' de Poitiers.

4.1 Description de deux modèles de fragmentation adaptés au régime supersonique

Nous rappelons sur la figure 4.1 la classification des modes de fragmentation, proposée par Pilch et Erdmann en fonction du nombre de Weber défini par [62] :

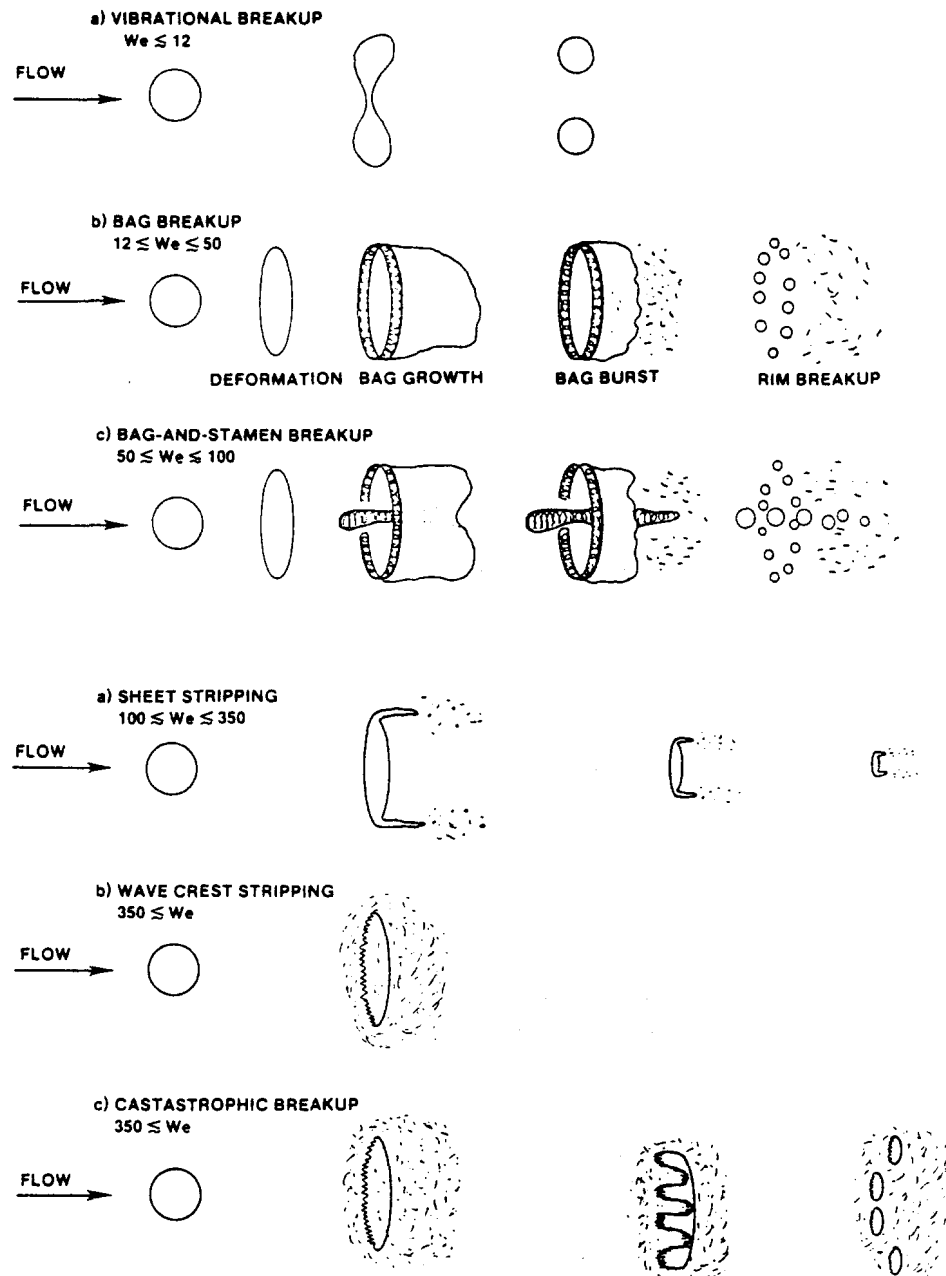


FIGURE 4.1 – Classification des modes de fragmentation ([62])

Nous traçons sur la figure 4.2 le nombre de Weber d'une particule de $100\mu\text{m}$ en fonction du nombre de Mach et de la hauteur à laquelle elle est injectée.

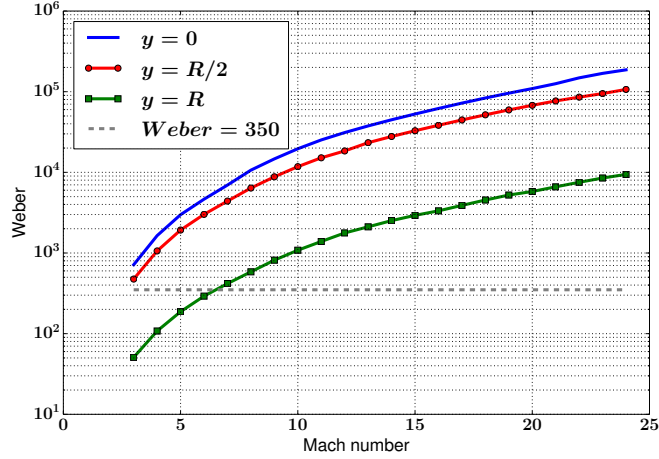


FIGURE 4.2 – Évolution du nombre de Weber après le choc en fonction du nombre de Mach amont et de la hauteur d'injection

Les nombres de Weber mis en jeu étant très importants, nous sommes dans presque toutes les configurations dans le cas d'une fragmentation de type "catastrophic breakup". Il existe plusieurs modèles adaptés à ce régime et en particulier aux écoulements supersoniques. Nous nous sommes concentrés sur deux modèles : celui de Reinecke, développé dans les années 1970, et celui de Chauvin, plus récent, qui date de 2015. Avant de passer à la description de ces modèles, nous rappelons quelques éléments de langage usuels pour la fragmentation : la particule avant fragmentation est appelée particule mère, indicée m et les particules obtenues à l'issue de la fragmentation sont appelées particules filles, indicées f . Le temps de fragmentation τ_{frag} est généralement dimensionné par le temps de Rayleigh τ_{Ra} :

$$\tau_{frag} = \tau_{Ra} t^* \quad (4.1)$$

où τ_{Ra} est défini par :

$$\tau_{Ra} = \frac{d}{\|\mathbf{v} - \mathbf{u}_f\|} \sqrt{\frac{\rho_p}{\rho_f}}$$

4.1.1 Description du modèle de fragmentation proposé par Reinecke

4.1.1.1 Présentation du modèle

Reinecke [65–67] a réalisé de nombreuses expériences dans des tubes à choc. Il a étudié le comportement d'une particule, initialement au repos, qui est balayée par le choc. Le tube à choc est composé de trois chambres : une chambre basse pression, une chambre haute

pression et une chambre d'expérience (cf. Fig. 4.3). La particule est dopée au plomb et observée *via* des rayons X (cf. Fig 4.4) et par ombroscopie (cf. Fig 4.5).

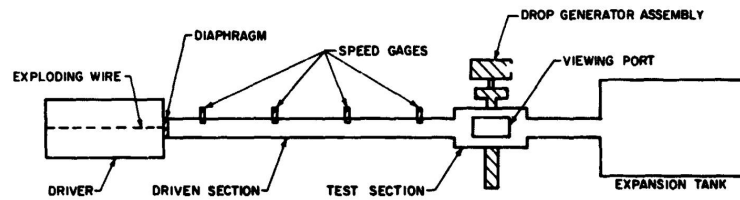


FIGURE 4.3 – Description de l'expérience de Reinecke [66]

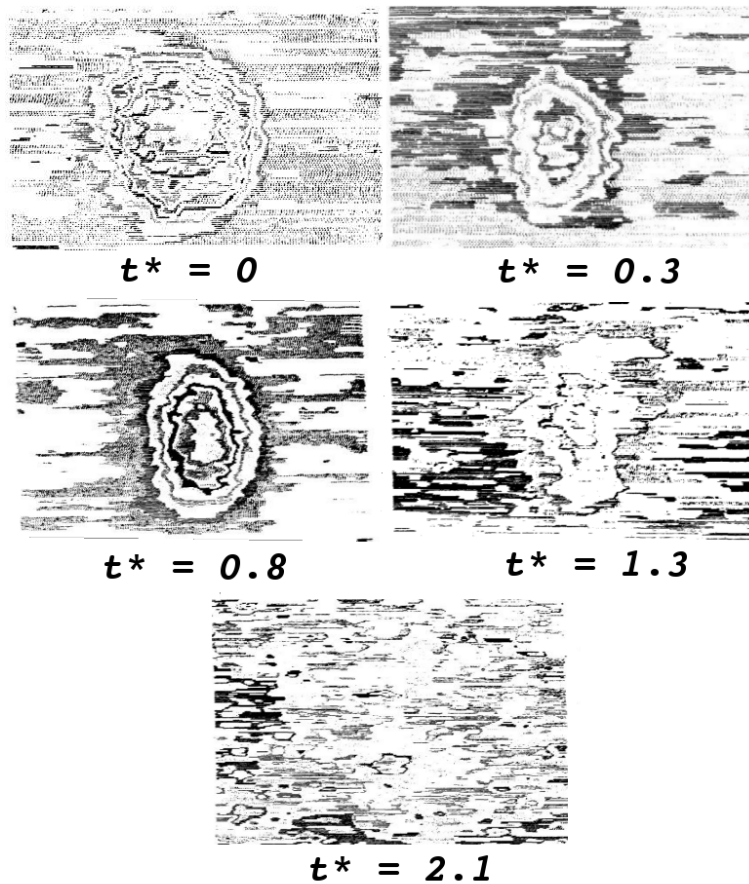


FIGURE 4.4 – Évolution de la particule durant sa fragmentation [67] : images obtenues par rayons X

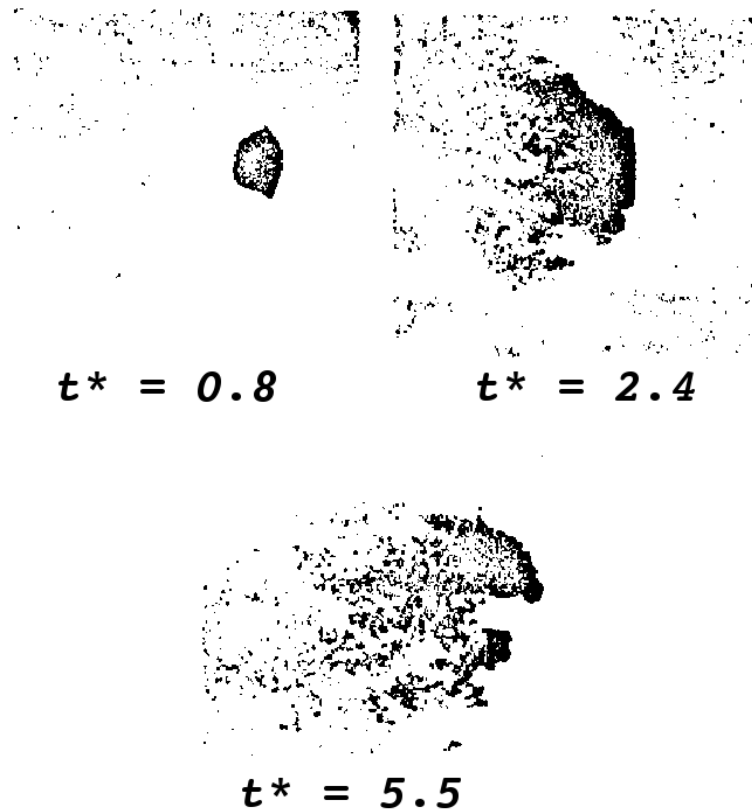


FIGURE 4.5 – Évolution de la particule durant sa fragmentation [65] : images obtenues par ombroscopie

Nous récapitulons dans le tableau 4.1 ci-dessous les plages d'étude des expériences de Reinecke :

	Minimal	Maximal
Diamètre de la particule (en mm)	0.5	2.5
Nombre de Mach	3	11

TABLE 4.1 – Caractéristiques des expériences de Reinecke

Suite à ces multiples expériences et observations, il propose la loi d'évolution suivante pour la masse de la particule mère (cf. Fig. 4.6) :

$$m_m(t) = \frac{m_m(t=0)}{2} \left(1 + \cos \left(\frac{\pi t}{\tau_{frag}} \right) \right) \quad (4.2)$$

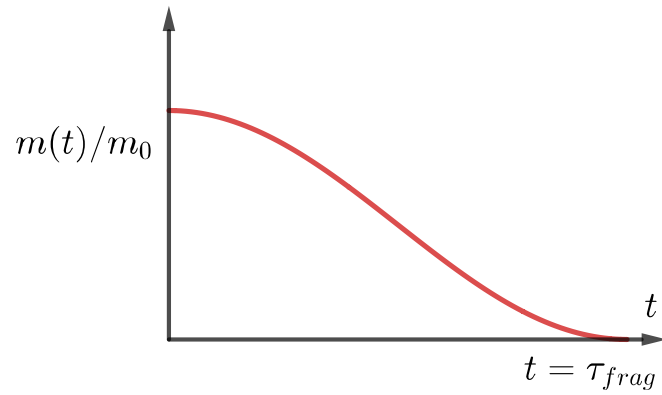


FIGURE 4.6 – Évolution de la masse de la particule durant sa fragmentation selon le modèle de Reinecke

Lors de ses premiers travaux, il estime le temps de fragmentation adimensionné entre 4 et 6. Ensuite, il corrèle le temps de fragmentation au nombre de Weber [67] :

$$t^* = 45 We^{-1/4} \quad (4.3)$$

Enfin, quelques années plus tard il propose une formule plus complexe dépendant de la valeur maximum du ratio de pression dynamique Q_m . Cette valeur est calculée en fonction du nombre de Mach incident du fluide M_f et du Mach relatif de la particule M_p . La formule proposée est la suivante :

$$\begin{cases} t^* Q_m^{1/2} = 22 (We - 8)^{-1/4} & \text{si } We < 1700 \\ t^* Q_m^{1/2} = 0.013 (We - 8)^{3/4} & \text{si } We \in [1700, 2700] \\ t^* Q_m^{1/2} = 22 (We - 8)^{-1/4} & \text{si } We > 2700 \end{cases} \quad (4.4)$$

avec :

$$\begin{cases} M_p = 0.78 + 0.73 \log(M_f - 0.7) \\ Q_m = 0.78 + \frac{1.47}{1 + 2.1 M_p^{3.4}} \end{cases} \quad (4.5)$$

Dans le modèle de Reinecke il n'y a pas de création de particules filles : la masse de la particule mère diminue pour directement produire de la vapeur d'eau (cf. Fig. 4.7)

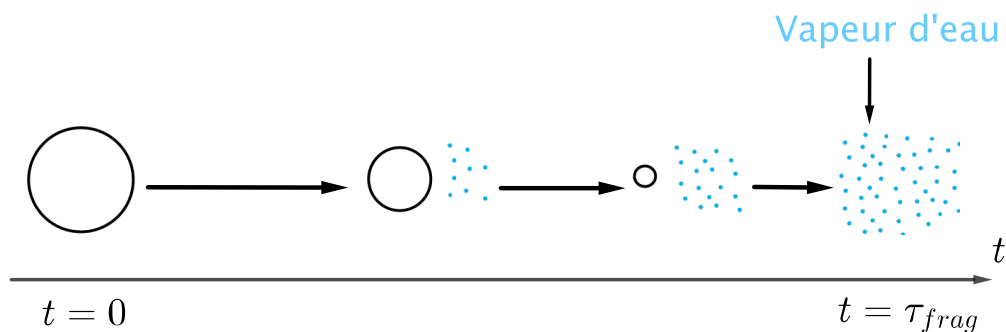


FIGURE 4.7 – Principe du modèle de Reinecke

4.1.1.2 Traitement numérique du modèle de fragmentation de Reinecke

Le modèle de Reinecke a été implémenté dans le code. Pour cela, nous avons réécrit l'équation d'évolution de la masse de la particule mère (4.2) en équation différentielle. Pour clarifier les équations à des fins de lisibilité, nous omettrons désormais les indices m puisqu'en l'absence de particules filles, il ne peut y avoir de confusion. $m(t)$ représente alors dans les équations suivantes la masse de la particule mère, en lieu et place de $m_m(t)$.

L'équation proposée par Reinecke est la suivante :

$$\frac{m(t)}{m_0} = \frac{1}{2} \left(1 + \cos \left(\frac{\pi t}{\tau_{frag}} \right) \right) \quad (4.6)$$

Il est alors possible d'exprimer le temps t en fonction de la masse m :

$$t = \frac{\tau_{frag}}{\pi} \arccos \left(\frac{2m(t)}{m_0} - 1 \right) \quad (4.7)$$

La dérivée temporelle de la masse m s'écrit :

$$\frac{dm(t)}{dt} = \frac{-\pi m_0}{2\tau_{frag}} \sin \left(\arccos \left(\frac{2m(t)}{m_0} - 1 \right) \right) \quad (4.8)$$

Or $\sin(\arccos(x)) = \sqrt{1 - x^2}$, ce qui permet de réécrire l'équation précédente :

$$\begin{aligned} \frac{dm(t)}{dt} &= \frac{-\pi m_0}{2\tau_{frag}} \sqrt{1 - \left(\frac{2m(t)}{m_0} - 1\right)^2} \\ &= \frac{-\pi}{\tau_{frag}} \sqrt{m(m_0 - m)} \end{aligned} \quad (4.9)$$

Cette équation admet la solution constante $m(t) = m_0$ qui n'est pas celle que nous souhaitons. C'est pourquoi, nous introduisons un paramètre ϵ de sorte que :

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{m(t)}{m_0} = \frac{1}{2} \left(1 + \cos\left(\frac{\pi t}{\tau_{frag}}\right) \right) \Rightarrow \begin{cases} \frac{dm(t)}{dt} = \frac{-\pi}{\tau_{frag}} \sqrt{m[(1 + \epsilon)m_0 - m]} \\ m(t = 0) = m_0 \end{cases} \quad (4.10)$$

Ainsi lorsque ϵ est suffisamment petit, la fonction proposée par Reinecke (cf. équation (4.6)) est bien solution de l'équation différentielle. D'un point de vue pratique le paramètre ϵ vaut :

$$\epsilon = 10^{-6} \quad (4.11)$$

La solution obtenue est alors la même que l'expression proposée par Reinecke. Pour réaliser le traitement numérique du modèle, nous avons introduit un temps caractéristique τ_{Rei} de manière à rester cohérent avec la technique de semi-implication choisie (confère partie 3.1.2.2 page 94). L'équation de conservation de la masse de particules pour une classe devient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} n m + \nabla_{\mathbf{x}}(n m \mathbf{v}) &= \frac{-n m}{\tau_{ev}} - \frac{n \pi}{\tau_{frag}} \sqrt{m[(1 + \epsilon)m_0 - m]} \\ &= \frac{-n m}{\tau_{ev}} - \frac{n m \pi}{\tau_{frag}} \sqrt{\frac{m_0}{m} (1 + \epsilon) - 1} \\ &= \frac{-n m}{\tau_{ev}} - \frac{n m}{\tau_{rei}} \end{aligned} \quad (4.12)$$

avec

$$\tau_{rei} = \frac{\tau_{frag}}{\pi \sqrt{\frac{m_0}{m} (1 + \epsilon) - 1}} \quad (4.13)$$

où τ_{frag} est donnée par l'expression (4.3).

Remarque : pour le calcul du nombre de Weber qui intervient dans l'expression (4.3), deux possibilités s'offrent à nous :

- la première consiste à calculer un nombre de Weber, dit "local", en utilisant les valeurs de la maille,
- la seconde consiste à calculer le nombre de Weber lorsque la particule traverse le choc et à le mémoriser pour le reste du calcul. Ce nombre de Weber est qualifié "d'initial".

Nous avons utilisé le Weber local.

Le système d'équation pour une classe vaut alors :

$$\left\{ \begin{array}{l} n^{n+1} \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_{rei}^n} \right) = n^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e \Phi_{n,e,K}^n |e| \\ n^{n+1} m^{n+1} \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_{ev}^n} + \frac{\Delta t}{\tau_{rei}^n} \right) = n^n m^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e \Phi_{nm,e,K}^n |e| \\ n^{n+1} m^{n+1} \mathbf{v}^{n+1} \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_{ev}^n} + \frac{\Delta t}{\tau_{dy}^n} + \frac{\Delta t}{\tau_{rei}^n} \right) = \\ \quad n^n m^n \mathbf{v}^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e \Phi_{nmv,e,K}^n |e| + \frac{\Delta t}{\tau_{dy}^n} n^{n+1} m^{n+1} \mathbf{u}_f \\ n^{n+1} m^{n+1} e^{n+1} \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_{ev}^n} + \frac{\Delta t}{\tau_{ch}^n c_{p,p}} + \frac{\Delta t}{\tau_{rei}^n} \right) = \\ \quad n^n m^n e^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e \Phi_{nme,e,K}^n |e| + \frac{\Delta t}{\tau_{ch}^n} n^{n+1} m^{n+1} T_f \\ n^{n+1} m^{n+1} \Psi^{n+1} \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_{ev}^n} + \frac{\Delta t}{\tau_{rei}^n} \right) = n^n m^n \Psi^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e \Phi_{nm\Psi,e,K}^n |e| \end{array} \right. \quad (4.14)$$

4.1.1.3 Validation de l'implémentation numérique du modèle de fragmentation de Reinecke

Afin de valider l'implémentation numérique du modèle, nous proposons, à l'instar de ce qui a été fait dans le chapitre précédent, deux cas tests :

- le calcul de l'évolution de la masse le long de la ligne d'arrêt,
- le calcul des flux de masse impactant la paroi d'une sphère.

Validation par comparaison de la masse de la particule mère le long de la ligne d'arrêt Le premier cas test consiste à étudier, le long de la ligne d'arrêt, la masse d'une particule mère. Pour cela, nous considérons l'écoulement d'un brouillard de particules de $100\mu m$ autour d'une sphère de $1m$ de rayon. Les effets thermodynamiques sont désactivés dans le code SDFS (Supersonic Dilute Flow Solver), afin d'isoler le phénomène de fragmentation. Le long de la ligne d'arrêt, il est possible de calculer la masse théorique m :

$$\frac{m(t)}{m_0} = \frac{1}{2} \left(1 + \cos \left(\frac{\pi t_{res}}{\tau_{frag}} \right) \right) \quad (4.15)$$

où t_{res} représente le temps passé dans la zone post-choc :

$$t_{res} = \begin{cases} 0 & \text{avant le choc} \\ > 0 & \text{dans la zone post-choc} \end{cases} \quad (4.16)$$

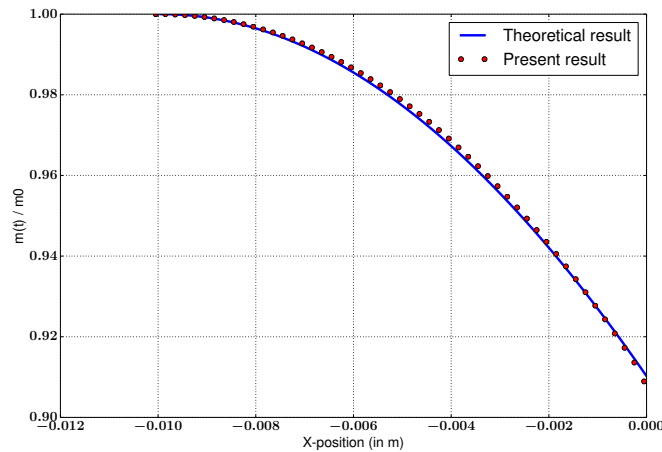


FIGURE 4.8 – Évolution de la masse le long de la ligne d'arrêt

Nous traçons sur la figure 4.8 l'évolution de la masse le long de la ligne d'arrêt. Le bon accord entre les résultats théoriques et numériques valide l'implémentation le long de la ligne d'arrêt. Afin de confirmer cette observation sur l'ensemble du domaine, nous avons créé un deuxième cas test.

Validation par comparaison des flux de masse impactant la paroi Considérons l'écoulement d'un brouillard composé de particules de $1000\mu m$. Nous choisissons des particules de diamètre plus important afin de s'assurer qu'elles ne sont pas entièrement fragmentées avant d'atteindre la paroi. En négligeant les effets thermiques et dynamiques,

il est possible de calculer la perte de masse des particules durant leurs trajets et ainsi calculer le flux de masse impactant la paroi.

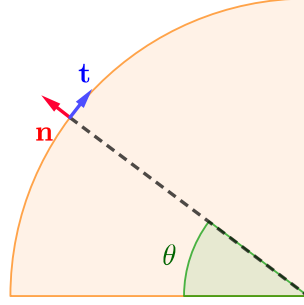


FIGURE 4.9 – Description de la géométrie étudiée

Soit θ un angle du quart de sphère étudiée (cf. Fig. 4.9). Il correspond à une hauteur y_θ . A cette hauteur y_θ correspond une distance Δy_θ entre le choc et la paroi de la sphère. Comme les effets thermodynamiques sont négligés, les particules ne sont ni ralenties ni déviées. Leurs temps de séjour dans la zone post-choc t^s vaut :

$$t^s = \frac{\Delta y_\theta}{v_\infty} \quad (4.17)$$

Le flux de masse à la paroi q se calcule alors de la façon suivante :

$$\begin{aligned} q(\theta) &= n m \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \\ &= n m v_\infty \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{n} \\ &= n v_\infty \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{n} \frac{m_0}{2} \left(1 + \cos \left(\frac{\pi t^s}{\tau_{frag}} \right) \right) \\ &= n v_\infty \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{n} \frac{m_0}{2} \left(1 + \cos \left(\frac{\Delta y_\theta \pi}{v_\infty \tau_{frag}} \right) \right) \end{aligned} \quad (4.18)$$

Le flux est classiquement adimensionné par le flux à l'infini amont q_∞ :

$$\begin{aligned} \frac{q(\theta)}{q_\infty} &= \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{n} \frac{1}{2} \left(1 + \cos \left(\frac{\Delta y_\theta \pi}{v_\infty \tau_{frag}} \right) \right) \\ &= \cos(\theta) \frac{1}{2} \left(1 + \cos \left(\frac{\Delta y_\theta \pi}{v_\infty \tau_{frag}} \right) \right) \end{aligned} \quad (4.19)$$

Nous traçons ci-dessous l'évolution du flux de masse adimensionné en fonction de l'angle θ .

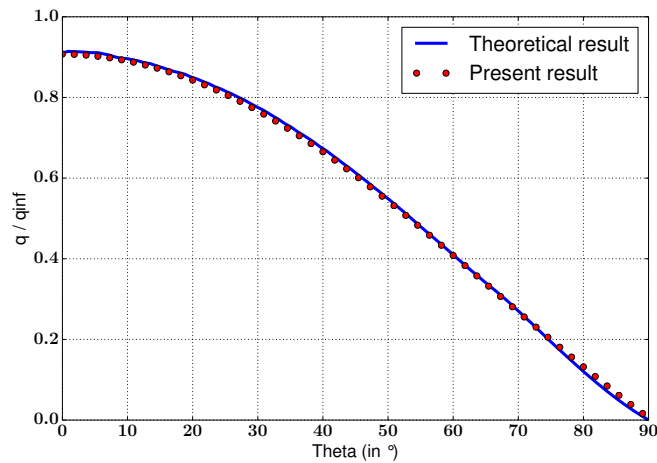


FIGURE 4.10 – Évolution du flux de masse adimensionné en fonction de l'angle θ : $600\mu m$ (à gauche) et $1000\mu m$ (à droite)

Là encore, la concordance entre les résultats théoriques et les résultats fournis par le code valide l'implémentation numérique du modèle de fragmentation de Reinecke. Avant de passer à l'étude de l'influence quantitative de la fragmentation sur le taux d'impact en paroi, nous présentons un second modèle de fragmentation, celui de Chauvin.

4.1.2 Description du modèle de fragmentation de Chauvin

4.1.2.1 Présentation du modèle

Durant sa thèse, Chauvin a réalisé des expériences dans un tube à choc [11–13]. Son dispositif expérimental est composé d'un tube à choc placé à la verticale. Il est composé de trois chambres : une chambre haute pression, une chambre basse pression et une chambre d'expérience. En haut de la chambre d'expérience un injecteur crée des particules d'eau de $500\mu m$. Par gravité les particules tombent et se répartissent de manière homogène dans la chambre d'expérience. Celle-ci est munie de capteurs de pression instantanée qui enregistrent la pression. L'ensemble du dispositif est représenté sur la figure 4.11.

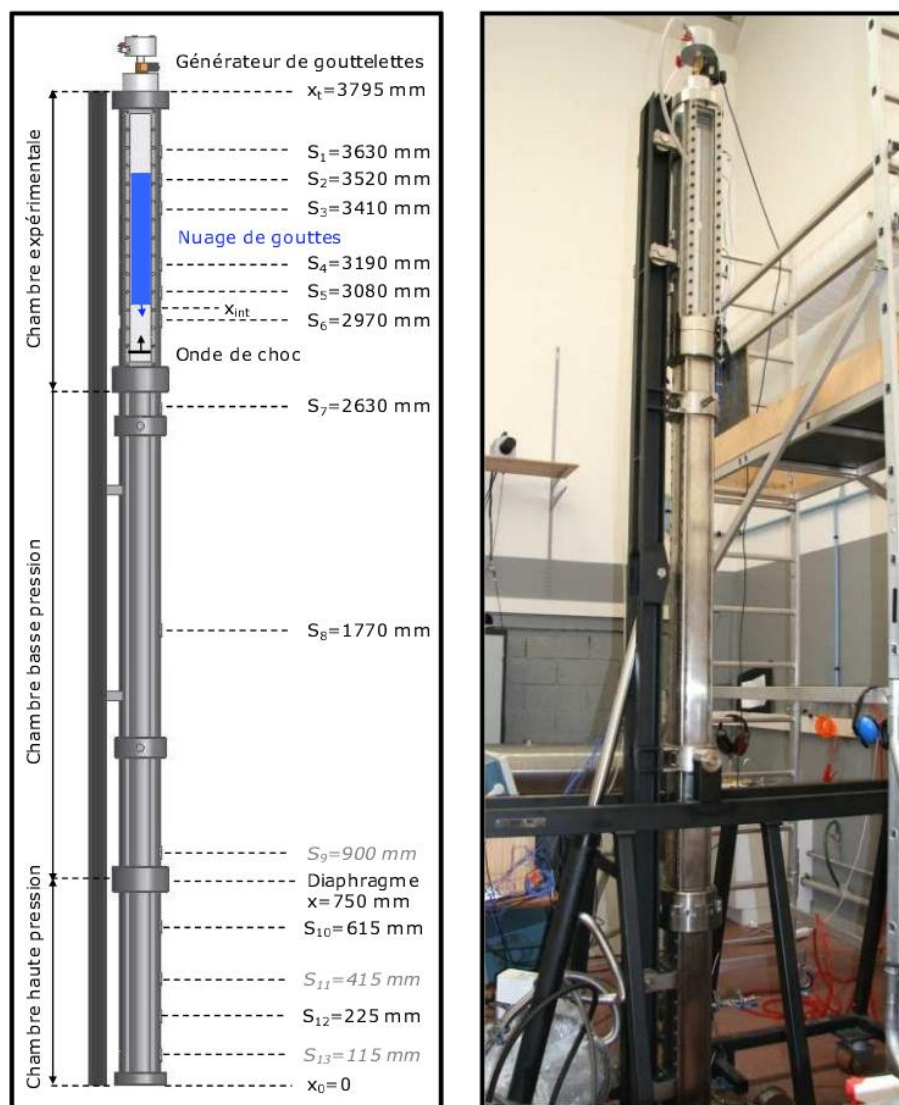


FIGURE 4.11 – Description du dispositif utilisé par Chauvin [13]

Les conditions initiales du fluide sont récapitulées dans le tableau ci-dessous 4.2.

L'observation des relevés de pression met en évidence une dépression lorsque le choc se trouve au niveau des particules (cf. Fig. 4.12 en rouge). Afin de comprendre ce phénomène, Alice Chauvin effectue une simulation numérique du tube à choc en considérant la présence de particules solides de mêmes propriétés physiques mais qui contrairement aux particules liquides ne peuvent fragmenter. Dans cette configuration, elle n'observe pas de dépression (cf. Fig. 4.12 en noir). Elle conclut que la dépression observée expérimentalement est liée à la fragmentation des particules liquides. Suite à cela, elle propose un modèle simplifié de fragmentation afin de restituer numériquement la dépression observée expérimentalement.

Grandeurs	Endroit	Valeurs
Température T_∞	Tube entier	299.7 K
Pression (en Pa)	Chambre haute pression	$6.813 \cdot 10^5$
Pression (en Pa)	Chambre basse pression	$1.0 \cdot 10^5$
Pression (en bar)	Chambre d'expérience	$1.0 \cdot 10^5$
Densité (en $kg.m^{-3}$)	Chambre haute pression	7.920
Densité (en $kg.m^{-3}$)	Chambre basse pression	1.162
Densité (en $kg.m^{-3}$)	Chambre d'expérience	1.162

TABLE 4.2 – Conditions initiales de l'expérience de Chauvin [13]

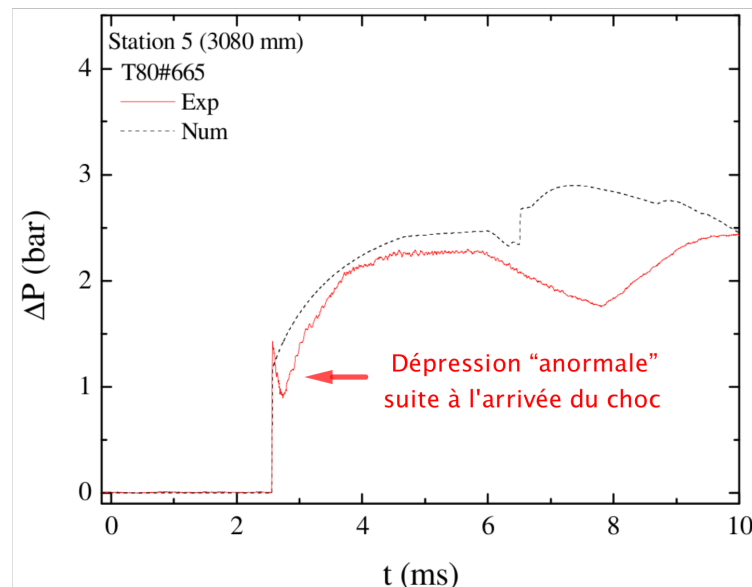


FIGURE 4.12 – Évolution de la pression dans la chambre d'expérience : comparaison entre la simulation d'un brouillard de particules solides (en noir) et l'expérience d'un brouillard de particules liquides (en rouge) [13]

Le modèle de Chauvin est basé sur l'hypothèse d'une décroissance linéaire du diamètre de la particule mère, combinée à l'hypothèse de conservation de la masse. Chauvin rajoute l'hypothèse simplificatrice très forte qu'à chaque instant la particule mère et les particules filles ont toutes le même diamètre. Pour que cette hypothèse soit compatible avec la conservation de la masse, Chauvin ne suppose pas que le nombre de particules filles est un entier, en particulier aux premiers instants du processus (cf. Fig. 4.13).

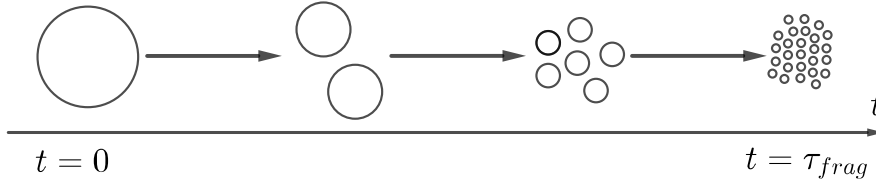


FIGURE 4.13 – Principe du modèle de Chauvin

L'évolution du diamètre des particules est donnée par la formule suivante :

$$\frac{dd(t)}{dt} = \frac{d_c - d(t)}{\tau_{frag}} \quad (4.20)$$

où d_c est le diamètre critique en dessous duquel la fragmentation s'arrête. Pour le calculer, Brodkey [8] suppose que le diamètre critique est celui qui permet de faire diminuer le nombre de Weber tout en maintenant les autres paramètres constants :

$$We(d_c) = We_c \Rightarrow \frac{d_c \rho_f \|\mathbf{v} - \mathbf{u}_f\|^2}{\sigma_p} = We_c \Rightarrow d_c = We_c \frac{\sigma_p}{\rho_f \|\mathbf{v} - \mathbf{u}_f\|^2} \quad (4.21)$$

il propose d'utiliser le nombre de Weber suivant :

$$We_c = 12 (1 + 1.077 Oh^{1.6}) \quad (4.22)$$

Le temps de fragmentation utilisé est celui de Pilch et Erdmann [61] :

$$t^* = \frac{\tau_{frag}}{\tau_{Ra}} = \begin{cases} 6 (We - 12)^{-0.25} & 12 < We < 18 \\ 2.45 (We - 12)^{0.25} & 18 < We < 45 \\ 14.1 (We - 12)^{-0.25} & 45 < We < 351 \\ 0.766 (We - 12)^{0.25} & 351 < We < 2670 \\ 5.5 & We > 2670 \end{cases} \quad (4.23)$$

A partir de l'équation sur le diamètre (4.20) et en utilisant l'hypothèse de conservation de la masse des particules durant le processus de fragmentation, nous obtenons la relation

suivante sur l'évolution du nombre de particules :

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} (n(t) m_p) = 0 &\Rightarrow \frac{dn(t)}{dt} = \frac{-n}{m_p} \frac{dm_p}{dt} \\
 &= \frac{-n}{d^3} \frac{dd^3}{dt} \\
 &= \frac{-3n}{d} \frac{dd(t)}{dt} \\
 &= \frac{-3n}{\tau_{frag}} \left(\frac{d_c}{d} - 1 \right)
 \end{aligned} \tag{4.24}$$

où m_p désigne la masse d'une particule de diamètre d .

4.1.2.2 Traitement numérique du modèle de fragmentation de Chauvin

Le modèle de Chauvin a été implémenté dans le code SDFS. Contrairement au modèle de Reinecke, qui modifie la masse des particules, celui de Chauvin agit sur le nombre de particules. Pour rester cohérent avec la discrétisation semi-implicite du schéma, nous avons introduit un temps caractéristique lié au modèle de Chauvin τ_f :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} n + \nabla_{\mathbf{x}}(n \mathbf{v}) &= \frac{3n}{\tau_{frag}} \left(1 - \frac{d_c}{d} \right) \\
 \frac{\partial}{\partial t} n + \nabla_{\mathbf{x}}(n \mathbf{v}) &= \frac{n}{\tau_f}
 \end{aligned} \tag{4.25}$$

avec :

$$\tau_f = \frac{\tau_{frag}}{3 \left(1 - \frac{d_c}{d} \right)} \tag{4.26}$$

Le système complet pour une classe de particules devient alors :

$$\left\{ \begin{array}{l}
 n^{n+1} \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_f^n} \right) = n^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e \Phi_{n,e,K}^n |e| \\
 n^{n+1} m^{n+1} \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_{ev}^n} \right) = n^n m^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e \Phi_{nm,e,K}^n |e| \\
 n^{n+1} m^{n+1} \mathbf{v}^{n+1} \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_{ev}^n} + \frac{\Delta t}{\tau_{dy}^n} \right) = \\
 \qquad n^n m^n \mathbf{v}^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e \Phi_{nmv,e,K}^n |e| + \frac{\Delta t}{\tau_{dy}^n} n^{n+1} m^{n+1} \mathbf{u}_f \\
 n^{n+1} m^{n+1} e^{n+1} \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_{ev}^n} + \frac{\Delta t}{\tau_{ch}^n c_{p,p}} \right) = \\
 \qquad n^n m^n e^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e \Phi_{nme,e,K}^n |e| + \frac{\Delta t}{\tau_{ch}^n} n^{n+1} m^{n+1} T_f \\
 n^{n+1} m^{n+1} \Psi^{n+1} \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_{ev}^n} \right) = n^n m^n \Psi^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e \Phi_{nm\Psi,e,K}^n |e|
 \end{array} \right. \quad (4.27)$$

4.1.2.3 Validation de l'implémentation numérique du modèle de fragmentation de Chauvin

Afin de valider l'implémentation numérique du modèle de Chauvin, nous avons utilisé les mêmes cas tests que ceux employés pour la validation de l'implémentation du modèle de Reinecke. Nous comparons, dans un premier temps, l'évolution du diamètre le long de la ligne d'arrêt et, dans un second temps, les flux de masse impactant la paroi.

Validation par comparaison du diamètre le long de la ligne d'arrêt Considérons l'écoulement d'un brouillard de particules de $100 \mu m$ autour d'un quart de sphère. Les effets thermodynamiques sont négligés. L'évolution du diamètre est donnée par la résolution de l'équation (4.20). En considérant d_c et τ_{frag} constants, le diamètre admet pour expression :

$$d(t) = d_c + (d_0 - d_c) e^{-t/\tau_{frag}} \quad (4.28)$$

Sur la figure 4.14, nous traçons l'évolution du diamètre le long de la ligne d'arrêt. Les courbes théorique et numérique sont en parfait accord.

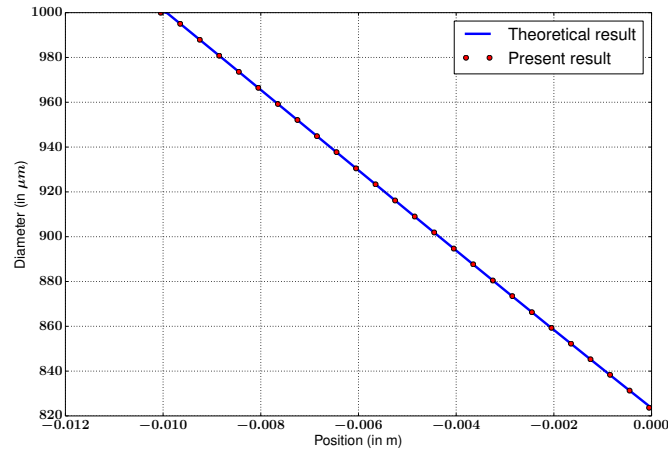


FIGURE 4.14 – Évolution du diamètre des particules le long de la ligne d'arrêt

Nous traçons maintenant les flux de masse impactant la paroi. La masse étant supposée constante, l'expression théorique du flux de masse est :

$$\frac{q(\theta)}{q_\infty} = \cos(\theta) \quad (4.29)$$

Sur la figure 4.15 qui représente le flux de masse en fonction de la position θ , la conservation de la masse est vérifiée. Cette dernière validation clôt cette partie et permet d'affirmer que le traitement numérique du modèle de Chauvin effectué dans le code SDFS est correct.

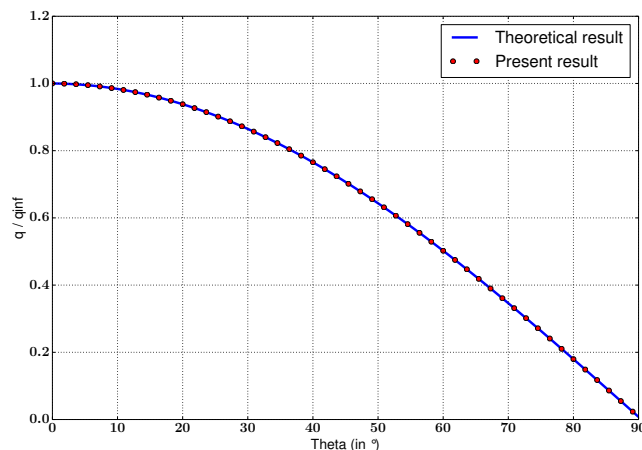


FIGURE 4.15 – Évolution du flux de masse adimensionné en fonction de l'angle θ

4.2 Mise en évidence de l'importance de la fragmentation dans la caractérisation d'un spray supersonique

Dans la partie précédente, nous avons présenté deux modèles de fragmentation adaptés au régime supersonique. Dans cette partie, nous allons mettre en exergue l'importance de la fragmentation dans la caractérisation des sprays supersoniques. Pour cela, dans un premier temps, nous calculerons le temps caractéristique de fragmentation. Dans un deuxième temps, nous analyserons l'influence sur le flux de masse impactant la paroi des trois phénomènes mis en jeu : la traînée, les effets thermiques et la fragmentation.

4.2.1 Évaluation du temps caractéristique de fragmentation

Le temps caractéristique de fragmentation est de l'ordre de cinq fois le temps de Rayleigh (confère 2.1.5.2 page 64). C'est la valeur que nous utiliserons par la suite :

$$\tau_{frag} = t^* \tau_{Ra} \simeq 5 \frac{d}{\|\mathbf{v} - \mathbf{u}_f\|} \sqrt{\frac{\rho_p}{\rho_f}} \quad (4.30)$$

Nous utiliserons les mêmes conditions amont que celles utilisées pour l'étude des temps caractéristiques des effets thermiques (cf. Tab. 1.4 page 24). Nous traçons ci-dessous (cf. Fig. 4.16) l'évolution du rapport entre le temps caractéristique de fragmentation et le temps de parcours. Le rapport est représenté en fonction du nombre de Mach et ce pour trois hauteurs : $y = 0$, $y = R/2$, $y = R$. Le diamètre de la particule est fixé à $100 \mu\text{m}$.

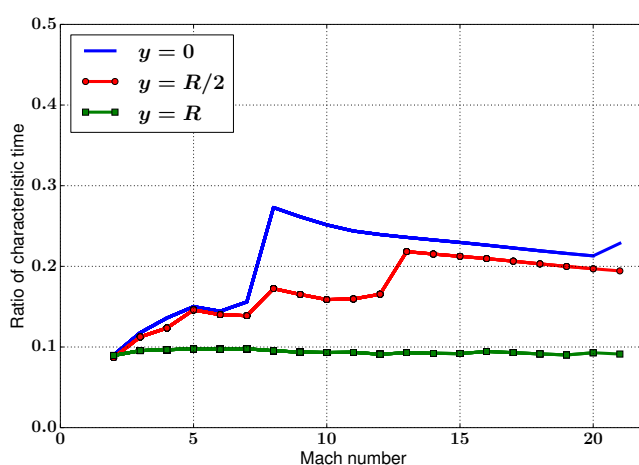


FIGURE 4.16 – Rapport entre le temps caractéristique de fragmentation et le temps de parcours : évolution en fonction du nombre de Mach amont pour différentes hauteurs

Le temps de fragmentation étant comparable au temps de parcours, il convient de modéliser la fragmentation avec précision. Afin d'illustrer cela, considérons que le temps de parcours des particules est égal au temps de fragmentation. En utilisant la description proposée par Reinecke, il n'y a aucune particule qui impacte la paroi, puisqu'elles se sont toutes évaporées. A l'inverse, le modèle de Chauvin prédit un grand nombre de particules ayant un diamètre $d_0 e^{-1} + d_c (1 - e^{-1}) \in]d_c, d_0[$. Le choix du modèle est alors déterminant dans le calcul des flux de masse impactant la paroi. Afin d'illustrer l'importance du choix du modèle dans un cas plus général, nous allons calculer les flux de masse en fonction du modèle de fragmentation utilisé.

4.2.2 Analyse des flux de masse impactant la paroi en fonction du modèle de fragmentation

Considérons l'écoulement d'un brouillard composé de particules de différents diamètres : $1\mu m, 10\mu m, 100\mu m, 200\mu m, 300\mu m, 400\mu m, 500\mu m, 600\mu m, 700\mu m, 800\mu m, 900\mu m, 1000\mu m$ autour d'une sphère de rayon $0.1m$. Les conditions amont de l'écoulement sont décrites dans le tableau 4.3.

Grandeurs	Valeurs de référence
Température T_∞	293 K
Pression P_∞	13332 Pa
Densité ρ_∞	0.16 kg.m ⁻³
Mach	10

TABLE 4.3 – Valeurs de référence utilisées pour les simulations

Nous calculons le flux de masse qui impacte la paroi en fonction de l'activation de la traînée, des effets thermiques et du modèle de fragmentation choisi. Dans le tableau 4.4, nous décrivons les cinq configurations utilisées.

Configuration	Traînée	Effets thermiques	Fragmentation
0	Désactivée	Désactivés	Désactivée
1	Activée	Désactivés	Désactivée
2	Activée	Modèle ablatif	Désactivée
3	Activée	Modèle ablatif	Modèle de Reinecke
4	Activée	Modèle ablatif	Modèle de Chauvin

TABLE 4.4 – Caractéristiques des différentes configurations utilisées

Les flux de masse impactant la paroi sont représentés en fonction de l'angle θ de la sphère pour les cinq configurations et les douze diamètres (cf. Fig. 4.17 à 4.22) :

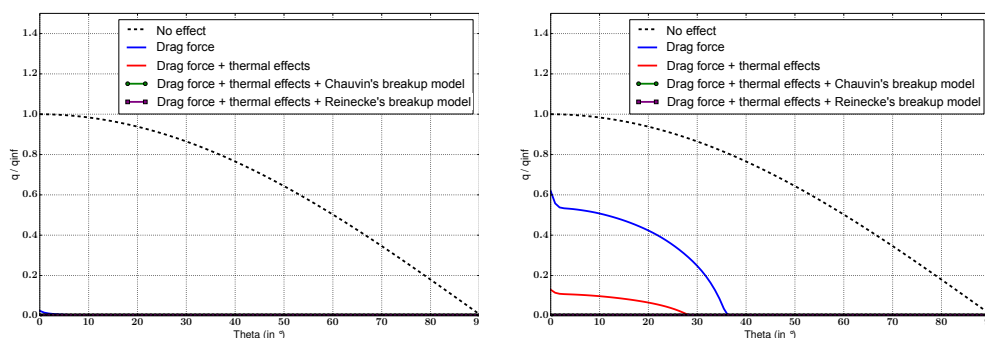


FIGURE 4.17 – Évolution du flux de masse impactant la paroi en fonction de la configuration étudiée, diamètre des particules : $1\mu m$ (à gauche), $10\mu m$ (à droite)

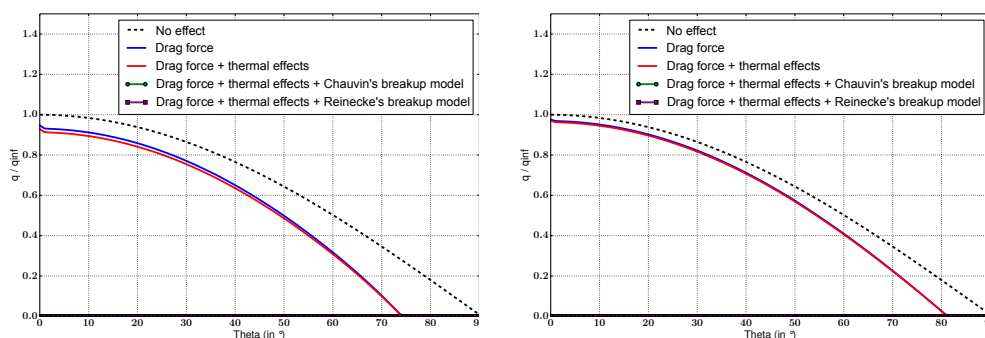


FIGURE 4.18 – Évolution du flux de masse impactant la paroi en fonction de la configuration étudiée, diamètre des particules : $100\mu m$ (à gauche), $200\mu m$ (à droite)

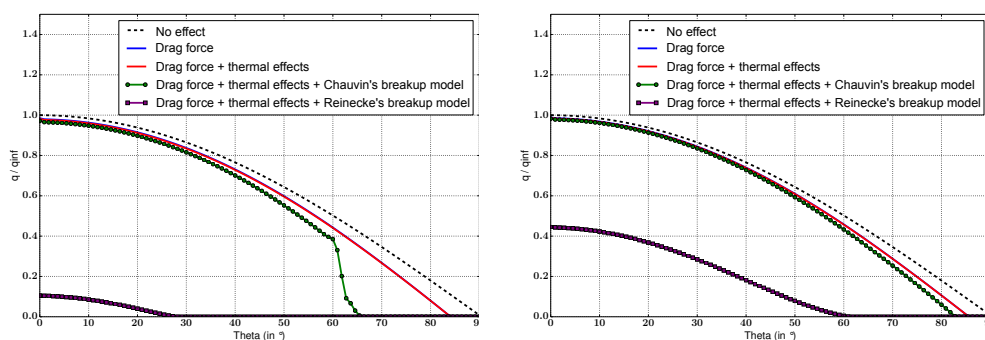


FIGURE 4.19 – Évolution du flux de masse impactant la paroi en fonction de la configuration étudiée, diamètre des particules : $300\mu m$ (à gauche), $400\mu m$ (à droite)

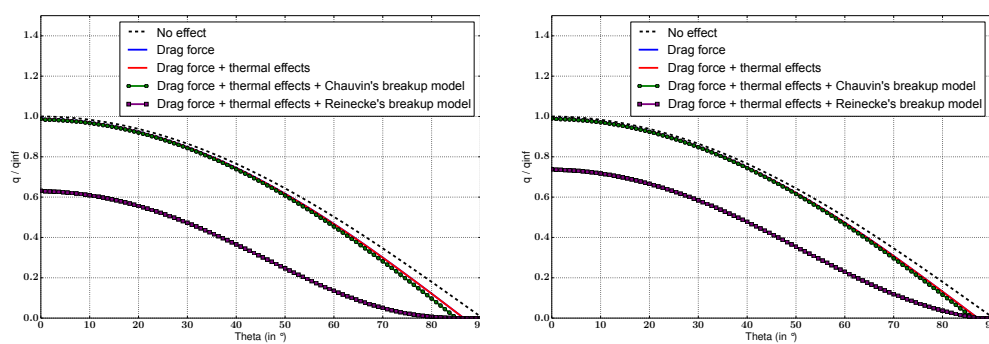


FIGURE 4.20 – Évolution du flux de masse impactant la paroi en fonction de la configuration étudiée, diamètre des particules : $500\mu\text{m}$ (à gauche), $600\mu\text{m}$ (à droite)

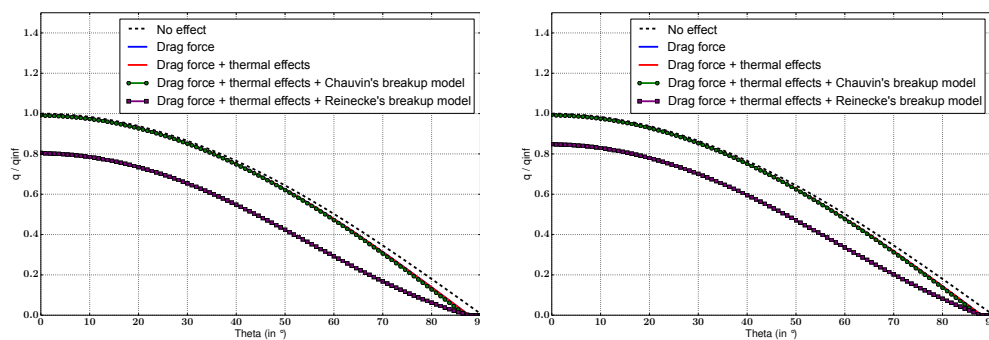


FIGURE 4.21 – Évolution du flux de masse impactant la paroi en fonction de la configuration étudiée, diamètre des particules : $700\mu\text{m}$ (à gauche), $800\mu\text{m}$ (à droite)

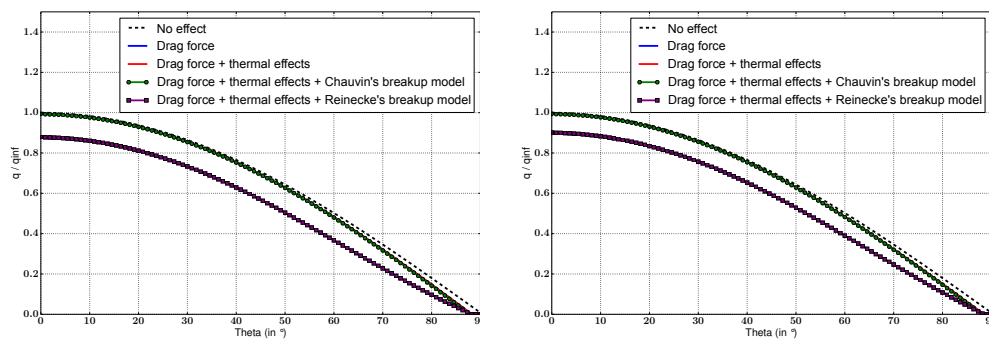


FIGURE 4.22 – Évolution du flux de masse impactant la paroi en fonction de la configuration étudiée, diamètre des particules : $900\mu\text{m}$ (à gauche), $1000\mu\text{m}$ (à droite)

L'analyse des flux de masse permet de confirmer deux tendances évoquées précédemment :

- les effets thermiques ne sont pas prédominants dans notre étude : l'activation des effets thermiques n'a pas d'effets notoires dès que la particule a un diamètre initial supérieur à $10\mu m$. *A fortiori*, les simulations présentées ont été faites avec le modèle ablatif qui a pour effet de maximiser l'influence des effets thermiques en favorisant l'évaporation au détriment du chauffage,
- le choix du modèle de fragmentation est crucial : les flux de masse peuvent être divisés par deux en fonction du modèle choisi.

Dans la partie suivante, nous allons mettre en évidence les limites des deux modèles précédents et nous allons proposer deux nouveaux modèles : un modèle d'étude paramétrique possédant de nombreux degrés de liberté, afin de mieux comprendre le phénomène de fragmentation, et un second basé sur des expériences de tube à choc très récentes, qui permet de mieux modéliser le comportement des particules durant leur fragmentation.

4.3 Description des nouveaux modèles de fragmentation

4.3.1 Description du modèle de fragmentation dit "à deux classes"

4.3.1.1 Mise en exergue des limites des modèles de Reinecke et de Chauvin

Les deux modèles présentés sont simples à implémenter et sont basés sur des expériences, c'est pourquoi ils sont très utilisés. Néanmoins, ils possèdent deux limites : une dans l'exploitation des expériences et l'autre dans le choix de modélisation.

Dans les expériences de Reinecke, l'utilisation de rayons X pour observer les particules impose de les doper avec du plomb. Cela peut altérer leurs comportements. De plus, les particules trop petites ne sont pas identifiables. En effet, il utilise des particules plus grosses ($2.12mm$) afin d'améliorer la visualisation. Il observe des particules tant que leur masse m est supérieure à 20% de la masse initiale. Compte tenu du diamètre initial utilisé, cela revient à observer des particules ayant un diamètre supérieur à $1mm$. Ainsi il est possible que des particules filles soient créées mais, possédant un diamètre inférieur à $1mm$, elles ne sont pas observées et sont confondues avec la vapeur d'eau environnante. Enfin, avec le modèle de Reinecke les particules filles sont injectées sous forme de vapeur, et ce même si la température du gaz est inférieure à la température d'évaporation de la particule mère.

Dans les expériences de Chauvin, les observations ne sont pas faites directement sur les particules mais sur la pression du fluide. C'est donc une mesure indirecte de la fragmentation. Il n'est pas assuré que le pic de pression caractérise la fragmentation : le pic observé résulte d'une configuration donnée (taille des particules, fraction volumique, ...) et une configuration différente peut, *a priori*, entraîner le même pic de pression.

Enfin, les deux modèles possèdent la même limitation : ils ne séparent pas les particules mères et les particules filles. Dans le modèle de Reinecke, les particules filles sont confondues avec la vapeur ; et dans le modèle de Chauvin, les particules mères et filles sont confondues. Cela impose les diamètres et vitesses des particules filles (cf. Tableau 4.6)

Modèle	Diamètre des particules filles	Vitesse des particules filles
Reinecke	0	Celle du gaz
Chauvin	Celle de la particule mère	Celle de la particule mère

TABLE 4.5 – Caractéristiques des différents modèles proposés

Les travaux de Pilch et Erdmann [61], O'Rourke et Amsden [59] et Hsiang et Faeth [41] ont montrés que les particules filles possèdent leurs propres caractéristiques. Afin de pallier ce problème, nous avons créé un modèle à deux classes : une classe pour les particules filles et une pour les particules mères.

4.3.1.2 Présentation du modèle

Ce modèle reprend, au choix, la loi d'évolution de la masse de la particule mère proposée par Reinecke ou celle proposée par Chauvin. En revanche, la masse perdue par la particule mère permet de créer une nouvelle classe de particules filles. Celles-ci sont supposées avoir toutes la même taille au moment de leur création (cf. Fig. 4.23). Leurs caractéristiques (diamètres et vitesses) ainsi que le temps de fragmentation sont ajustables. Ce nouveau modèle permet de séparer les deux populations de particules qui ont désormais chacune leur histoire propre. De plus, il possède plus de degrés de liberté (cf. Tab. 4.6). Ce modèle a été créé pour analyser l'influence respective de chaque paramètre sur le pic de dépression observé expérimentalement par Chauvin.

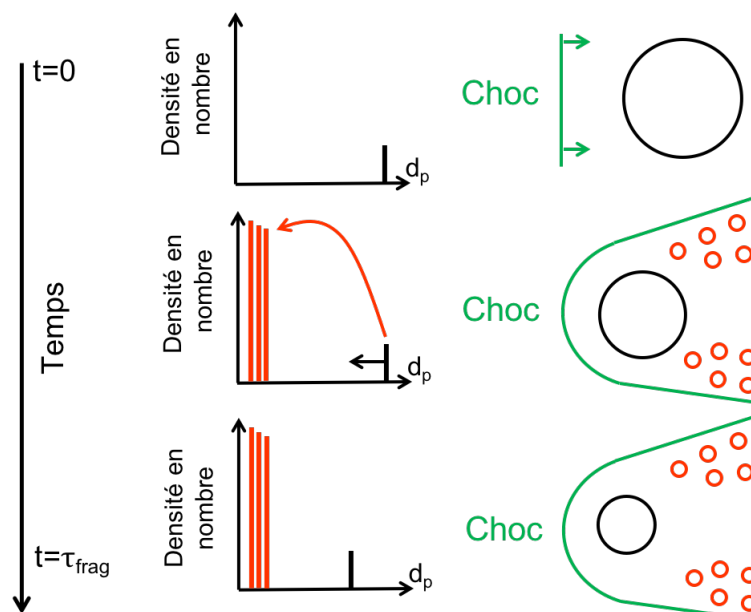


FIGURE 4.23 – Principe du schéma à deux classes

Modèle	Reinecke	Chauvin	Nouveau modèle
Temps de fragmentation	Libre	Libre	Libre
Diamètre final de la particule mère	Imposé	Libre	Libre
Diamètre des particules filles	Imposé	Imposé	Libre
Vitesse des particules filles	Imposé	Imposé	Libre

TABLE 4.6 – Caractéristiques des différents modèles proposés

4.3.1.3 Traitement numérique du modèle à deux sections

Afin de simuler les particules mères et les particules filles, chaque classe de particules mères est dupliquée à l'initialisation. Les classes de particules filles sont vides au début du calcul et se remplissent au fur et à mesure que les particules mères se fragmentent. Au moment de leur création, les particules filles sont injectées avec leur propre masse et vitesse, mais gardent la même température et le même facteur de déformation que leur particule mère. Dans la suite du calcul, nous reprendrons les notations du chapitre 2 : les indices * désigneront les particules mères et les indices \diamond les particules filles.

Les équations d'une classe de particules mères sont identiques à celles des modèles de Reinecke ou de Chauvin. En notant τ_{bk*}^n le temps caractéristique de fragmentation de la particule mère, valant τ_{rei*}^n ou τ_{f*}^n en fonction du modèle choisi, les équations discrètes

correspondant à une classe de particules mères sont les suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l}
 n_*^{n+1} \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_{bk_*}^n} \right) = n_*^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e \Phi_{n_*,e,K}^n |e| \\
 n_*^{n+1} m_*^{n+1} \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_{ev_*}^n} + \frac{\Delta t}{\tau_{bk_*}^n} \right) = n_*^n m_*^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e \Phi_{nm_*,e,K}^n |e| \\
 n_*^{n+1} m_*^{n+1} \mathbf{v}_*^{n+1} \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_{ev_*}^n} + \frac{\Delta t}{\tau_{dy_*}^n} + \frac{\Delta t}{\tau_{bk_*}^n} \right) = \\
 \qquad n_*^n m_*^n \mathbf{v}_*^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e \Phi_{nmv_*,e,K}^n |e| + \frac{\Delta t}{\tau_{dy_*}^n} n_*^{n+1} m_*^{n+1} \mathbf{u}_f \\
 n_*^{n+1} m_*^{n+1} e_*^{n+1} \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_{ev_*}^n} + \frac{\Delta t}{\tau_{ch_*}^n} c_{p,p} + \frac{\Delta t}{\tau_{bk_*}^n} \right) = \\
 \qquad n_*^n m_*^n e_*^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e \Phi_{nme_*,e,K}^n |e| + \frac{\Delta t}{\tau_{ch_*}^n} n_*^{n+1} m_*^{n+1} T_f \\
 n_*^{n+1} m_*^{n+1} \Psi_*^{n+1} \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_{ev_*}^n} + \frac{\Delta t}{\tau_{bk_*}^n} \right) = n_*^n m_*^n \Psi_*^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e \Phi_{nm\Psi_*,e,K}^n |e|
 \end{array} \right. \quad (4.31)$$

Les équations d'une classe de particules filles se déduisent alors facilement :

$$\left\{ \begin{array}{l}
 n_{\diamond}^{n+1} = n_{\diamond}^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e \Phi_{n_{\diamond},e,K}^n |e| + \frac{n_*^{n+1} m_*^{n+1} \Delta t}{\tau_{bk_*}^n m_{cre}} \\
 n_{\diamond}^{n+1} m_{\diamond}^{n+1} \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_{ev_{\diamond}}^n} \right) = n_{\diamond}^n m_{\diamond}^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e \Phi_{nm_{\diamond},e,K}^n |e| + \frac{n_*^{n+1} m_*^{n+1} \Delta t}{\tau_{bk_*}^n} \\
 n_{\diamond}^{n+1} m_{\diamond}^{n+1} \mathbf{v}_{\diamond}^{n+1} \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_{ev_{\diamond}}^n} + \frac{\Delta t}{\tau_{dy_{\diamond}}^n} \right) = \\
 \quad n_{\diamond}^n m_{\diamond}^n \mathbf{v}_{\diamond}^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e \Phi_{nmv_{\diamond},e,K}^n |e| + \frac{\Delta t}{\tau_{dy_{\diamond}}^n} n_{\diamond}^{n+1} m_{\diamond}^{n+1} \mathbf{u}_f + \frac{n_*^{n+1} m_*^{n+1} \Delta t v_{cre}}{\tau_{bk_*}^n} \\
 n_{\diamond}^{n+1} m_{\diamond}^{n+1} e_{\diamond}^{n+1} \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_{ev_{\diamond}}^n} + \frac{\Delta t}{\tau_{ch_{\diamond}}^n c_{p,p}} + \frac{\Delta t}{\tau_{bk_{\diamond}}^n} \right) = \\
 \quad n_{\diamond}^n m_{\diamond}^n e_{\diamond}^n - \sum_e \frac{\Delta t}{|K|} \Phi_{nme_{\diamond},e,K}^n |e| + \frac{\Delta t}{\tau_{ch_{\diamond}}^n} n_{\diamond}^{n+1} m_{\diamond}^{n+1} T_f + \frac{n_*^{n+1} m_*^{n+1} \Delta t e_*^n}{\tau_{bk_*}^n} \\
 n_{\diamond}^{n+1} m_{\diamond}^{n+1} \Psi_{\diamond}^{n+1} \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_{ev_{\diamond}}^n} + \frac{\Delta t}{\tau_{bk_{\diamond}}^n} \right) = \\
 \quad n_{\diamond}^n m_{\diamond}^n \Psi_{\diamond}^n - \frac{\Delta t}{|K|} \sum_e \Phi_{nm\Psi_{\diamond},e,K}^n |e| + \frac{n_*^{n+1} m_*^{n+1} \Delta t \Psi_*^n}{\tau_{bk_*}^n}
 \end{array} \right. \quad (4.32)$$

où m_{cre} et v_{cre} désignent respectivement la masse et la vitesse des particules filles au moment où elles sont créées.

Remarque : lors de la fragmentation, de nouvelles particules filles sont injectées avec cette masse et ce diamètre. Elles se mélangent ensuite avec les anciennes particules filles pour former un ensemble dont la masse et la vitesse est une moyenne pondérée entre celle des anciennes et celle des nouvelles particules filles. Le modèle à deux classes a été implémenté dans le code SDFS. Dans le chapitre suivant, nous étudierons l'influence des paramètres m_{cre} , v_{cre} sur la restitution du pic de pression observé dans l'expérience de Chauvin.

4.3.2 Description du modèle multiclassés

Le modèle décrit précédemment est un modèle paramétrique, avec de fortes hypothèses simplificatrices dont l'objectif est d'améliorer notre compréhension des phénomènes liés à la fragmentation et en particulier de la sensibilité à certains paramètres. Néanmoins, n'étant que très peu validé par des expériences, il ne peut être utilisé pour modéliser la fragmentation dans un code industriel. Dans cette partie, nous allons décrire les principes d'un nouveau modèle de fragmentation en cours d'élaboration sur la base d'expériences réalisées à l'institut P' à Poitiers (France). Les expériences étant en cours, nous n'en décrirons dans ce manuscrit que les principales conclusions et donnerons volontairement peu de détails. Un article est en cours de rédaction sur la description de l'expérience, les moyens d'acquisition et les premiers résultats. Nous ne donnerons que les bases du nouveau modèle ainsi que son expression dans le cadre de la formulation Eulérienne.

4.3.2.1 Description du dispositif expérimental et présentation des principaux résultats

Le dispositif expérimental permet d'étudier le comportement d'une particule sous choc. La particule, initialement au repos, est placée dans un tube à choc (cf. Fig. 4.24). Elle est maintenue en équilibre grâce à des fils très fins (en rouge sur la figure 4.25) disposés en croix. Ces fils sont eux-même accrochés à une structure solide extrudée (en orange et noir sur la figure 4.25).

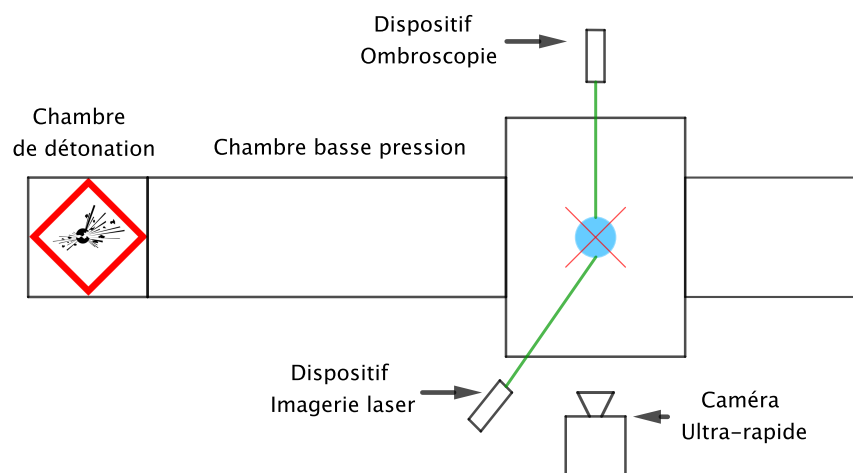


FIGURE 4.24 – Dispositif global de la manipulation

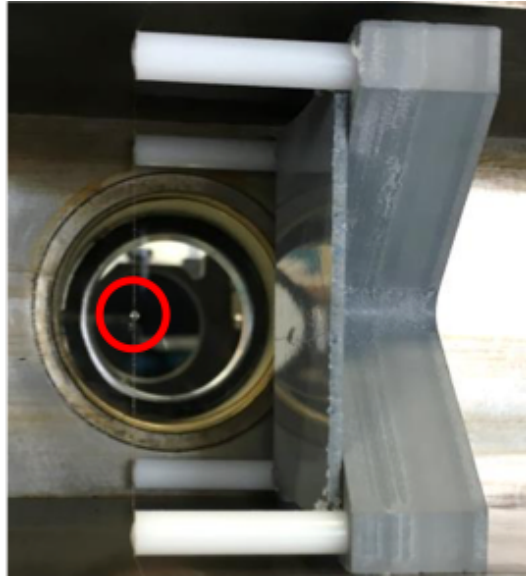


FIGURE 4.25 – Dispositif permettant de maintenir la particule

Une étincelle est créée dans la chambre de détonation entraînant la création du choc. Celui-ci se propage dans le tube et arrive au niveau de la particule (cf. Fig. 4.24). L'évolution de la particule est observée grâce à une caméra ultra-rapide qui fournit des images d'ombroscopie (en éclairant par l'arrière) et d'imagerie laser (en éclairant par l'avant). De plus, des simulations numériques réalisées avec le code d'hydrodynamique HESIONE [4] viennent compléter l'analyse des résultats expérimentaux.

Sur les figures 4.26 à 4.29 nous représentons les résultats d'ombroscopie obtenus expérimentalement ainsi que les résultats issus des simulations numériques (à l'échelle de la particule). La couleur des images d'ombroscopie a été inversée afin de permettre la superposition avec les simulations numériques : le blanc correspond à la présence de particules et le noir à l'absence. Les simulations représentent la particule (en noir) ainsi que les gradients de densité du fluide (en rouge). Les simulations numériques donnent une excellente restitution de l'expérience et permettent d'avoir accès à la structure interne de la particule durant sa fragmentation. Enfin, la figure 4.30 est une image d'ombroscopie obtenue expérimentalement pour des temps longs pour lesquels la simulation n'a pas été faite.

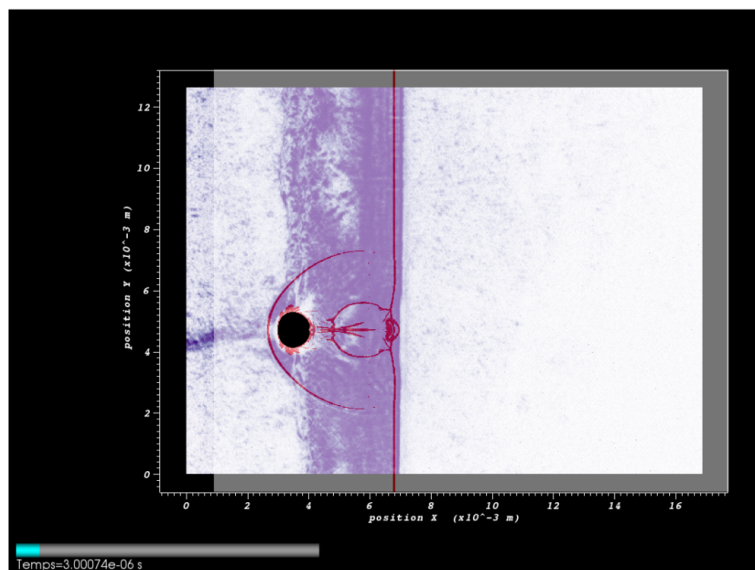


FIGURE 4.26 – Évolution de la particule durant sa fragmentation : comparaison entre résultat expérimental et simulation

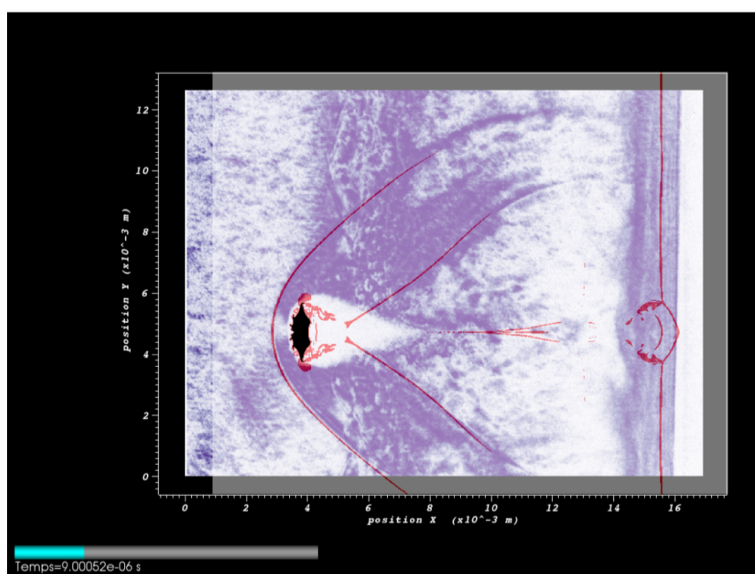


FIGURE 4.27 – Évolution de la particule durant sa fragmentation : comparaison entre résultat expérimental et simulation

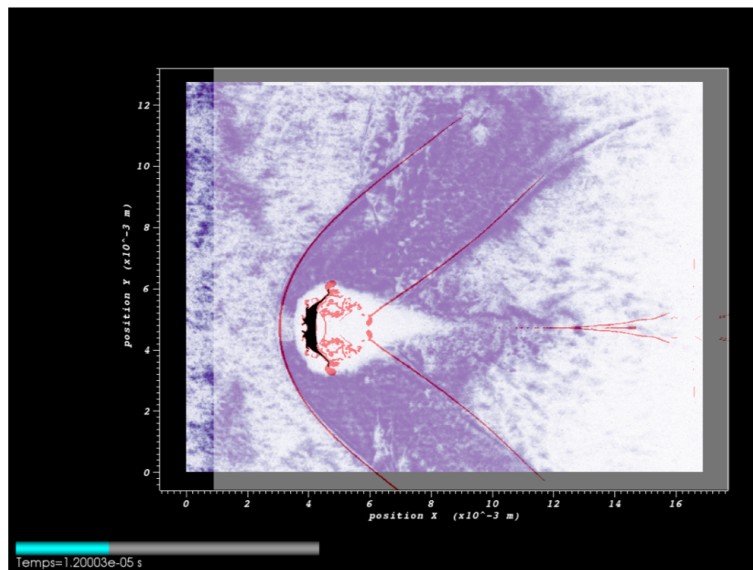


FIGURE 4.28 – Évolution de la particule durant sa fragmentation : comparaison entre résultat expérimental et simulation

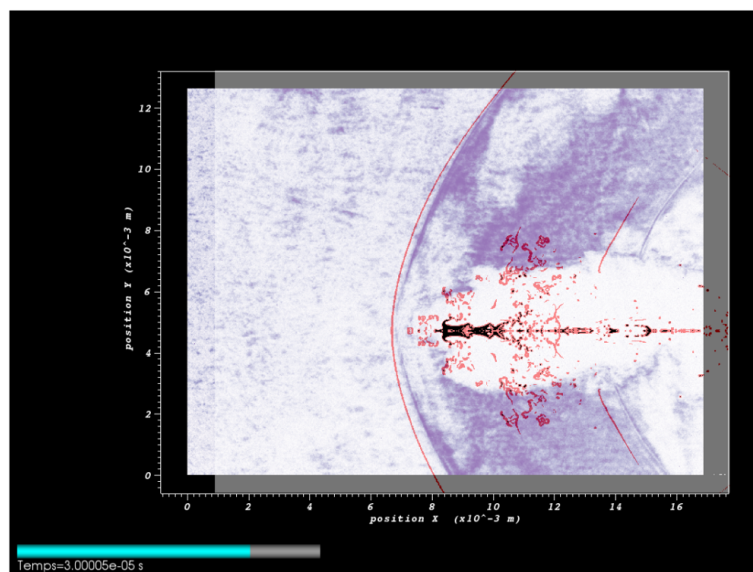


FIGURE 4.29 – Évolution de la particule durant sa fragmentation : comparaison entre résultat expérimental et simulation

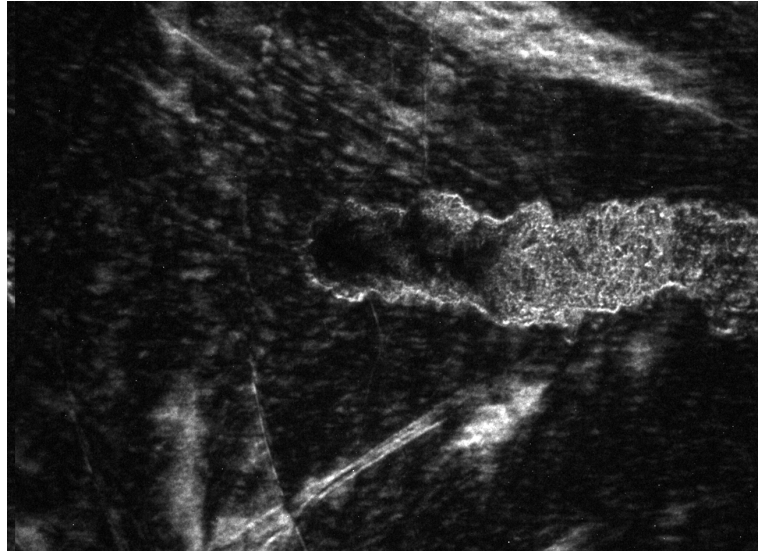


FIGURE 4.30 – Évolution de la particule durant sa fragmentation : résultat expérimental pour des temps longs

4.3.2.2 Présentation du modèle proposé

En s'appuyant sur l'ensemble des données expérimentales et numériques disponibles, nous avons construit un nouveau modèle de fragmentation constitué de trois étapes décrites sur la figure 4.31 :

- une première phase durant laquelle la particule se déforme à masse constante. Elle passe de sa forme sphérique initiale à une forme asymétrique composée d'un résidu central (en bleu sur la figure 4.31) et d'une membrane (en vert) globalement axisymétrique.
- une deuxième étape où la membrane externe se fragmente, donnant naissance à de nouvelles particules plus petites. Simultanément, le résidu central prend une forme cylindrique.
- une dernière étape dans laquelle le résidu central se fragmente à son tour jusqu'à atteindre une forme et une masse stables.

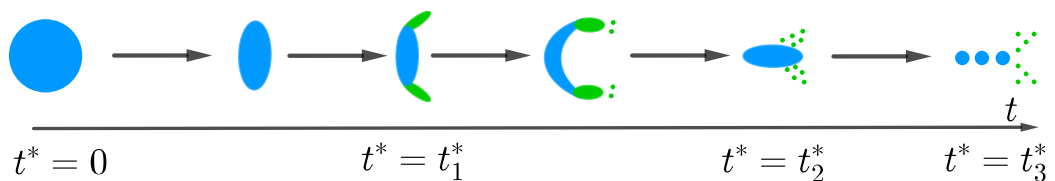


FIGURE 4.31 – Différentes étapes du nouveau modèle de fragmentation

La première phase commence lorsque le choc arrive au niveau de la particule. Elle se termine lorsque la particule a pris sa forme asymétrique et est entourée d'une membrane extérieure. Nous n'avons malheureusement pas l'image expérimentale correspondant exactement à la fin de la première phase. En effet, sur l'image 4.27 la membrane n'est pas totalement formée et sur l'image 4.28 elle est déjà entraînée par le gaz et commence à se fragmenter. La figure 4.29 correspond à la fin de la deuxième étape : le résidu central a pris sa forme cylindrique et la membrane est totalement fragmentée. Enfin, la fin de la dernière étape correspond à la figure 4.30 dans laquelle le résidu central s'est fragmenté en particules le long de l'axe.

Après cette description très qualitative des phénomènes, nous allons quantifier les différentes étapes *via* l'introduction de plusieurs paramètres. Comme nous l'avons déjà indiqué, la particule se déforme au cours des différentes étapes. Afin de prendre en compte cette déformation, nous pouvons utiliser le temps de fragmentation adimensionné t^* (cf.4.1). Le coefficient de traînée et le nombre de Nusselt peuvent être calculés grâce à ce temps adimensionné :

$$\begin{aligned} C_D^{def} &= C_D g^{CD}(t^*) \\ Nu^{*,def} &= Nu^* g^{Nu^*}(t^*) \end{aligned} \quad (4.33)$$

où C_D et Nu désignent respectivement le coefficient de traînée et le nombre de Nusselt pour une sphère rigide et g^{CD} et g^{Nu} sont des fonctions sans dimension qui permettent de tenir compte de l'effet de déformation sur le coefficient de traînée et d'échange thermique. Ces fonctions sont supposées affines durant chaque étape de fragmentation. Dans ces expressions, t^* est utilisé à la place du facteur de déformation Ψ dont nous avons parlé précédemment car il permet de mesurer le temps écoulé depuis le début du processus de fragmentation. Par définition, il est nul tant que la fragmentation n'a pas commencé et augmente ensuite :

$$\frac{dt^*}{dt} = \bar{\nu} = \begin{cases} 0 & \text{si } We < We^* \\ \frac{1}{\tau_{Ra}} & \text{sinon, avec } \tau_{Ra} = \frac{d}{\|\mathbf{v} - \mathbf{u}_f\|} \sqrt{\frac{\rho_p}{\rho_f}} \end{cases} \quad (4.34)$$

A l'injection d'une nouvelle particule le temps est supposé nul par convention. Le paramètre We^* est un paramètre du modèle ($We^* \simeq 12$).

Première étape : elle commence dès que le temps t^* n'est plus nul. Elle se finit, par définition, à un temps t_1^* . La particule, initialement sphérique de masse m_0 , se déforme en un résidu central de masse αm_0 et une membrane externe de masse $(1 - \alpha) m_0$. Cette

étape débute lorsque le temps t^* est supérieur au temps t_0^* . Les fonctions g valent :

$$\begin{aligned} g^{CD}(t^*) &= g_0^{CD} \frac{t_1^* - t^*}{t_1^* - t_0^*} + g_1^{CD} \frac{t^* - t_0^*}{t_1^* - t_0^*} \\ g^{Nu}(t^*) &= g_0^{Nu} \frac{t_1^* - t^*}{t_1^* - t_0^*} + g_1^{Nu} \frac{t^* - t_0^*}{t_1^* - t_0^*} \end{aligned} \quad (4.35)$$

où g_0^{CD} , g_0^{Nu} , g_1^{CD} , g_1^{Nu} sont des paramètres constants. Comme la particule est initialement sphérique, g_0^{CD} et g_0^{Nu} valent 1 par définition.

Deuxième étape : elle se produit entre le temps t_1^* et t_2^* . Le résidu central conserve sa masse αm_0 mais prend une forme cylindrique. Les fonctions g valent :

$$\begin{aligned} g^{CD}(t^*) &= g_1^{CD} \frac{t_2^* - t^*}{t_2^* - t_1^*} + g_2^{CD} \frac{t^* - t_1^*}{t_2^* - t_1^*} \\ g^{Nu}(t^*) &= g_1^{Nu} \frac{t_2^* - t^*}{t_2^* - t_1^*} + g_2^{Nu} \frac{t^* - t_1^*}{t_2^* - t_1^*} \end{aligned} \quad (4.36)$$

g_2^{CD} et g_2^{Nu} sont deux paramètres du modèle.

Dans un même temps, la membrane se fragmente en particules. Celles-ci sont supposées sphériques de vitesse \mathbf{v}^{frag} et de diamètre d . La vitesse \mathbf{v}^{frag} est comprise entre la vitesse du résidu central et celle du gaz et dépend *a priori* du diamètre du fragment considéré. La densité en nombre de fragments de diamètre d est supposée distribuée selon une loi exponentielle :

$$f_2(d) = k_2 \exp(-d/\bar{d}_2) \quad (4.37)$$

k_2 est un paramètre de normalisation qui permet de garantir que la masse globale des fragments soit égale à la masse $(1 - \alpha) m_0$ de la membrane. \bar{d}_2 est un paramètre ajustable du modèle lié au diamètre moyen des fragments et fonction de la taille initiale de la particule et de sa vitesse relative par rapport au gaz.

Troisième étape : la fragmentation se termine lorsque le temps t^* atteint t_3^* . Durant cette dernière phase, le résidu central de masse αm_0 se fragmente à son tour jusqu'à atteindre une taille stable, notée βm_0 . Il est alors supposé sphérique. Durant ce processus la densité en nombre des particules produites est supposée être répartie selon une autre loi exponentielle de la forme :

$$f_3(d) = k_3 \exp(-d/\bar{d}_3) \quad (4.38)$$

Sur l'intervalle $[t_2^*, t_3^*]$ les fonctions g valent :

$$\begin{aligned} g^{CD}(t^*) &= g_2^{CD} \frac{t_3^* - t^*}{t_3^* - t_2^*} + g_3^{CD} \frac{t^* - t_2^*}{t_3^* - t_2^*} \\ g^{Nu}(t^*) &= g_2^{Nu} \frac{t_3^* - t^*}{t_3^* - t_2^*} + g_3^{Nu} \frac{t^* - t_2^*}{t_3^* - t_2^*} \end{aligned} \quad (4.39)$$

avec $g_3^{CD} = g_3^{Nu} = 1$ puisque le résidu est supposé sphérique à la fin du processus de fragmentation.

Récapitulatif : ce modèle possède un grand nombre de paramètres que nous rappelons ci-dessous :

- t_1^* , t_2^* et t_3^*
- α et β
- \bar{d}_2 et \bar{d}_3
- g_1^{CD} , g_1^{Nu} , g_2^{CD} , g_2^{Nu}

qui sont actuellement en cours de calibration grâce aux résultats expérimentaux ainsi qu'aux simulations numériques.

4.3.2.3 Formulation Eulérienne du modèle de fragmentation multiclassés

Reprenons le système d'équations d'une classe i tel qu'obtenu à la fin du chapitre 2 :

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} n_i + \nabla_{\mathbf{x}}(n_i \mathbf{v}_i) &= Q_i^n \\ \frac{\partial}{\partial t} (n_i m_i) + \nabla_{\mathbf{x}}(n_i m_i \mathbf{v}_i) &= Q_i^{nm} + n_i m'(d_i) \Phi_{d_i} \\ \frac{\partial}{\partial t} (n_i m_i \mathbf{v}_i) + \nabla_{\mathbf{x}}(n_i m_i \mathbf{v}_i \otimes \mathbf{v}_i) &= \mathbf{Q}_i^{nmv} + n_i m'(d_i) \Phi_{d_i} \mathbf{v}_i + n_i m_i \Phi_{\mathbf{v}_i} \\ \frac{\partial}{\partial t} (n_i m_i e_i) + \nabla_{\mathbf{x}}(n_i m_i \mathbf{v}_i e_i) &= Q_i^{nme} + n_i m'(d_i) \Phi_{d_i} e_i + n_i m_i \Phi_{e_i} \\ \frac{\partial}{\partial t} (n_i m_i t_i^*) + \nabla_{\mathbf{x}}(n_i m_i \mathbf{v}_i t_i^*) &= Q_i^{nmt^*} + n_i m'(d_i) \Phi_{d_i} t_i^* + n_i m_i \Phi_{t_i^*} \end{aligned} \right. \quad (4.40)$$

où n_i représente le nombre de particules par unité de volume, d_i le diamètre, \mathbf{v}_i la vitesse, e_i l'énergie interne et t_i^* le temps de fragmentation adimensionné (qui joue un rôle similaire au facteur de déformation Ψ_i). Les termes $m'(d_i)$, Φ_{d_i} , $\Phi_{\mathbf{v}_i}$ et Φ_{e_i} ayant été décrits précédemment, il reste à déterminer l'expression des termes liés à la fragmentation : Q_i^n , Q_i^{nm} , \mathbf{Q}_i^{nmv} , Q_i^{nme} , $Q_i^{nmt^*}$ et $\Phi_{t_i^*}$.

Expression des termes Q_i^n et Q_i^{nm} Supposons la phase particulaire composée de N classes. Introduisons ν_l le taux de fragmentation massique durant la phase l défini comme suit :

$$\frac{dm_i}{dt^*} = -\nu_l m_i \quad (4.41)$$

L'équation précédente peut aussi s'écrire sous forme dimensionnelle :

$$\frac{dm_i}{dt} = -\bar{\nu}_i \nu_l m_i \quad (4.42)$$

où $\bar{\nu}_i$ est donnée par :

$$\bar{\nu}_i = \sqrt{\frac{\rho_p}{\rho_f}} \frac{d_i}{\|\mathbf{v} - \mathbf{u}_f\|} \quad (4.43)$$

En supposant ν_l constant durant chaque phase et en utilisant la conservation de la masse, il est possible de calculer l'expression de ν durant chaque phase :

$$\begin{cases} \nu_1 = 0 \\ \nu_2 = -\frac{\ln(\alpha)}{t_2^* - t_1^*} \\ \nu_3 = \frac{\ln(\alpha) - \ln(\beta)}{t_3^* - t_2^*} \end{cases} \quad (4.44)$$

Les termes Q_i^n et Q_i^{nm} ont alors pour expression :

$$Q_i^n = \sum_{k=1}^N \bar{\nu}_k \nu_{k,l} N_{ki} n_k m_k \quad (4.45)$$

$$Q_i^{nm} = -\bar{\nu}_i \nu_l n_i m_i + \sum_{k=1}^N \bar{\nu}_k \nu_l M_{ki} n_k m_k \quad (4.46)$$

N_{ki} correspond au nombre de particules par unité de volume initialement dans la classe k et dont les particules filles sont injectées dans la classe i . M_{ki} est son pendant en masse. En considérant que la taille des particules filles est inférieure à celles des particules mères, la conservation de la masse pour la classe i permet de calculer la valeur du coefficient de normalisation k_i :

$$\int_0^{d_i} k_i \frac{\pi d^3}{6} \rho_p \exp\left(\frac{-x}{d_{l,i}}\right) dx = \bar{\nu}_i \nu_l n_i m_i \quad (4.47)$$

avec $l = 2,3$. Soit F_k la fonction définie par :

$$F_k(x) = \int_0^x s^k \exp(-s) ds \quad (4.48)$$

Le coefficient k_i vaut alors :

$$k_i = \frac{6 \bar{\nu}_i \nu_l n_i m_i}{\rho_p \pi F_3 \left(\frac{d_i}{\bar{d}_{l,i}} \right) \bar{d}_{l,i}^{-3}} \quad (4.49)$$

Supposons que les classes soient ordonnées en ordre croissant avec :

$$d_1 < \dots < d_N \quad (4.50)$$

Lorsqu'une particule de la classe i se fragmente, elle donne naissance à des particules filles réparties dans les classes $[1, \dots, i]$. Introduisons maintenant le diamètre interclasse $d_{p+1/2}$:

$$d_{p+1/2} = \frac{d_p + d_{p+1}}{2} \quad (4.51)$$

Par convention, nous posons $d_{1/2} = 0$ et $d_{p+1/2} = d_p$. Les particules filles ayant un diamètre compris entre $d_{p-1/2}$ et $d_{p+1/2}$ se trouvent affectées à la classe p . L'introduction de ces diamètres interclasses permet de calculer de manière explicite les termes N_{ki} et M_{ki} :

$$\begin{aligned} \bar{\nu}_k \nu_l M_{ki} \rho_p \alpha_k &= \int_{d_{i-1/2}}^{d_{i+1/2}} k_k \frac{\pi d^3}{6} \rho_p \exp\left(\frac{-d}{\bar{d}_{l,k}}\right) dd \\ &= k_k \frac{\rho_p \pi \bar{d}_{l,k}^{-3}}{6} \left(F_3 \left(\frac{d_{i+1/2}}{\bar{d}_{l,k}} \right) - F_3 \left(\frac{d_{i-1/2}}{\bar{d}_{l,k}} \right) \right) \end{aligned} \quad (4.52)$$

$$\begin{aligned} \bar{\nu}_k \nu_l N_{ki} \rho_p \alpha_k &= \int_{d_{i-1/2}}^{d_{i+1/2}} k_k \exp\left(\frac{-d}{\bar{d}_{l,k}}\right) dd \\ &= k_k \rho_p \bar{d}_{l,k} \left(F_0 \left(\frac{d_{i+1/2}}{\bar{d}_{l,k}} \right) - F_0 \left(\frac{d_{i-1/2}}{\bar{d}_{l,k}} \right) \right) \end{aligned} \quad (4.53)$$

En combinant ces expressions avec l'équation (4.47) nous obtenons pour tout $k \leq i$:

$$M_{ki} = \frac{F_3 \left(\frac{d_{i+1/2}}{\bar{d}_{l,k}} \right) - F_3 \left(\frac{d_{i-1/2}}{\bar{d}_{l,k}} \right)}{F_3 \left(\frac{d_k}{\bar{d}_{l,k}} \right)} \quad (4.54)$$

$$N_{ki} = \frac{F_0 \left(\frac{d_{i+1/2}}{\bar{d}_{l,k}} \right) - F_0 \left(\frac{d_{i-1/2}}{\bar{d}_{l,k}} \right)}{F_0 \left(\frac{d_k}{\bar{d}_{l,k}} \right)} \quad (4.55)$$

et pour tout $k > i$ nous avons $M_{ki} = N_{ki} = 0$.

Expression des termes Q_i^{nmv} et Q_i^{nme} Les termes Q_i^{nmv} et Q_i^{nme} s'expriment comme la somme d'un terme de perte et d'un terme de gain. Le terme de perte est lié à la fragmentation des particules initialement dans la classe i , tandis que le terme de gain correspond à l'injection de nouvelles particules dans la classe i résultant de la fragmentation de particules plus grandes :

$$Q_i^{nmv} = -\bar{\nu}_i \nu_l n_i m_i \mathbf{v}_i + \sum_{k=1}^N \bar{\nu}_k \nu_l M_{ki} n_k m_k \mathbf{v}_{\mathbf{k},i}^{\text{frag}} \quad (4.56)$$

$$Q_i^{nme} = -\bar{\nu}_i \nu_l n_i m_i e_i + \sum_{k=1}^N \bar{\nu}_k \nu_l M_{ki} n_k m_k e_k \quad (4.57)$$

$\mathbf{v}_{\mathbf{k},i}^{\text{frag}}$ est la vitesse moyenne à laquelle sont injectées, dans la classe i , des particules qui se trouvaient initialement dans la classe k avant leur fragmentation. Cette vitesse doit être comprise entre la vitesse \mathbf{v}_k et celle du gaz.

Expression des termes $Q_i^{nmt^*}$ et $\Phi_{t_i^*}$ Le terme $\Phi_{t_i^*}$ se déduit de l'expression (4.41) :

$$\Phi_{t_i^*} = \bar{\nu}_i t_i^* \quad (4.58)$$

Comme le temps adimensionné des particules filles est supposé nul, l'expression de $Q_i^{nmt^*}$ ne possède qu'un terme de perte lié à la fragmentation des particules initialement présentes dans la classe i :

$$Q_i^{nmt^*} = -\bar{\nu}_i \nu_l n_i m_i t_i^* \quad (4.59)$$

Expression globale du système pour une classe En reprenant les différentes expressions, nous obtenons le système complet pour la classe i :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} n_i + \nabla_{\mathbf{x}}(n_i \mathbf{v}_i) = \sum_{k=1}^N \bar{\nu}_k \nu_{k,l} N_{ki} n_k m_k \\ \frac{\partial}{\partial t} n_i m_i + \nabla_{\mathbf{x}}(n_i m_i \mathbf{v}_i) = \\ \quad - \bar{\nu}_i \nu_l n_i m_i + \sum_{k=1}^N \bar{\nu}_k \nu_l M_{ki} n_k m_k + n_i m'(d_i) \Phi_{d_i} \\ \frac{\partial}{\partial t} n_i m_i \mathbf{v}_i + \nabla_{\mathbf{x}}(n_i m_i \mathbf{v}_i \otimes \mathbf{v}_i) = \\ \quad - \bar{\nu}_i \nu_l n_i m_i \mathbf{v}_i + \sum_{k=1}^N \bar{\nu}_k \nu_l M_{ki} n_k m_k \mathbf{v}_k^{\text{frag}} + n_i m'(d_i) \Phi_{d_i} \mathbf{v}_i + n_i m_i \Phi_{\mathbf{v}_i} \\ \frac{\partial}{\partial t} n_i m_i e_i + \nabla_{\mathbf{x}}(n_i m_i \mathbf{v}_i e_i) = \\ \quad - \bar{\nu}_i \nu_l n_i m_i e_i + \sum_{k=1}^N \bar{\nu}_k \nu_l M_{ki} n_k m_k e_k + n_i m'(d_i) \Phi_{d_i} e_i + n_i m_i \Phi_{e_i} \\ \frac{\partial}{\partial t} n_i m_i t_i^* + \nabla_{\mathbf{x}}(n_i m_i \mathbf{v}_i t_i^*) = \\ \quad - \bar{\nu}_i \nu_l n_i m_i t_i^* + n_i m'(d_i) \Phi_{d_i} t_i^* + n_i m_i \Phi_{t_i^*} \end{array} \right. \quad (4.60)$$

Les paramètres We^* , t_1^* , t_2^* , t_3^* , α , β , \bar{d}_2 , \bar{d}_3 , g_1 , g_2 et \mathbf{v}^{frag} sont actuellement en cours de calibration grâce aux expériences et aux simulations numériques. Leurs valeurs seront détaillées dans un article dédié, en cours de préparation.

Remarque : Contrairement aux autres phénomènes, la fragmentation est un processus qui couple les différentes classes entre elles. Cependant, pour des raisons physiques évidentes, seules les classes d'une même "famille" peuvent interagir entre elles. Les classes associées aux particules "secondaires" issues de l'impact des particules "primaires" sur la paroi d'un solide ne doivent pas être couplées par le processus de fragmentation aux particules primaires. Il suffit pour cela de regrouper les classes en familles et d'utiliser un ordonnancement de type (4.50) pour chacune des familles.

4.4 Conclusion

Ce chapitre a permis de mettre en évidence l'importance de la fragmentation dans l'étude des brouillards en régime supersonique. Suite à ce constat, nous avons développé deux

nouveaux modèles afin de pallier les lacunes des modèles de la littérature :

- un modèle paramétrique simple afin de pouvoir analyser facilement l'influence de certains paramètres physiques (taille et vitesse moyennes des particules filles) sur des grandeurs mesurables expérimentalement,
- un modèle plus physique, mais également plus complexe, basé sur des expériences encore en cours et des résultats de simulation numérique directe.

Chapitre 5

Premières applications du modèle pour la restitution d'expériences complexes d'interaction d'un brouillard avec un choc

Sommaire

Nomenclature du chapitre 5	180
5.1 Expérience d'Alice Chauvin	182
5.1.1 Diagramme d'ondes (x,t) dans le tube à choc	183
5.1.2 Mise en évidence de trois états	185
5.1.3 Caractérisation de la pression asymptotique	188
5.1.4 Pistes d'amélioration du modèle	193
5.2 Expérience de Boeing	198
5.2.1 Présentation de l'expérience	198
5.2.2 Présentation des travaux de Hulin et Znaty [44]	199
5.2.3 Reproduction des travaux de Hulin et Znaty [44]	201
5.2.4 Étude de sensibilité	217
5.3 Conclusion	227

Nomenclature du chapitre 5

Lettres romanes		Unité
\mathbf{u}_f	Vitesse du fluide	$m.s^{-1}$
$\widetilde{\mathbf{u}}_f$	Vitesse moyenne de Favre du fluide	$m.s^{-1}$
$\mathbf{S}_{\rho k}$	Terme source dans l'équation de turbulence du fluide	$kg.m^2.s^{-3}$
d_f	Diamètre de la (des) particule(s) filles	m
d_m	Diamètre de la (des) particule(s) mères	m
n	Nombre de particules par unité de volume	m^{-3}
\mathbf{F}	Force de traînée subit par la (les) particule(s)	$kg.m.s^{-2}$
\mathbf{v}	Vitesse de la (des) particule(s)	$m.s^{-1}$
\mathbf{v}_f	Vitesse de la (des) particule(s) fille(s)	$m.s^{-1}$
\mathbf{v}_m	Vitesse de la (des) particule(s) mère(s)	$m.s^{-1}$
Lettres grecques		
ρ_f	Densité du fluide	$kg.m^{-3}$
ρ_p	Densité de la (des) particule(s)	$kg.m^{-3}$
τ_{frag}	Temps caractéristique de fragmentation	s
τ_{Pilch}	Temps caractéristique de fragmentation proposé par Pilch	s

Nombre sans dimension

C_D	Coefficient de traînée de la (des) particule(s)
Ma_p	Nombre de Mach particulaire
Re_p	Nombre de Reynolds particulaire
α_p	Fraction volumique de particules au sein du fluide
α_{turb}	Paramètre de restitution de la turbulence
α_v	Paramètre de restitution de vitesse
β_{C_D}	Paramètre de proportionnalité du coefficient de traînée
ϵ_n	Coefficient de restitution normale
ϵ_t	Coefficient de restitution tangentielle
ϵ_{tot}	Coefficient de restitution

Dans le chapitre 3, nous avons validé le code SDFS (Supersonic Dilute Flow Solver) via une série de tests élémentaires. Dans ce chapitre, nous allons utiliser le code pour restituer deux expériences de la littérature. La première, réalisée par Alice Chauvin [11–13], a été abordée dans le chapitre précédent. Elle porte sur l'interaction d'une onde de choc instationnaire avec un brouillard de particules liquides. La seconde expérience a été réalisée à la soufflerie supersonique de Boeing dans les années 1970 et concerne l'interaction d'un choc détaché stationnaire avec un brouillard de particules solides [17, 25].

5.1 Expérience d'Alice Chauvin

Comme nous l'avons expliqué dans le chapitre précédent (confère les caractéristiques de l'expérience dans la partie 4.1.2.1, page 149), Alice Chauvin a effectué des expériences de tube à choc avec des particules liquides. Elle a observé, *via* des capteurs instantanés de pression, une dépression due à la fragmentation des particules (cf. Fig.. 5.1).

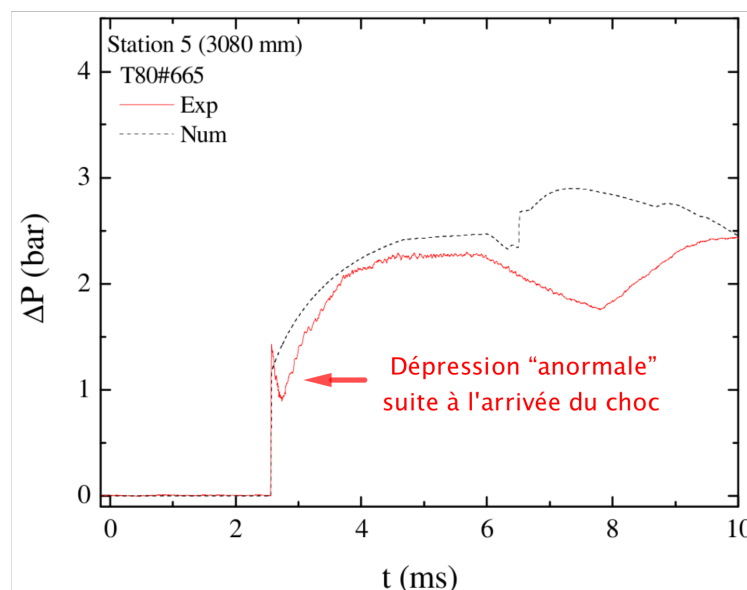


FIGURE 5.1 – Évolution de la pression en fonction du temps dans la chambre d'expérience à une abscisse x fixée : comparaison entre la simulation d'un brouillard de particules solides (en noir) et l'expérience réalisée avec des particules liquides (en rouge), de même taille et de même densité [13]

Dans cette partie, nous allons chercher à mieux comprendre l'origine de cette dépression. Pour cela, nous nous appuyons sur le modèle à deux classes développé dans le chapitre précédent (confère partie 4.3.1.2 page 161). Dans la suite du manuscrit, nous appellerons NMC (New Model with Chauvin's mass decrease law) le modèle à deux classes basé sur le même taux de décroissance de masse de la particule liquide mère que celui proposé par Chauvin ; et NMR (New Model with Reinecke's mass decrease law) le modèle à deux classes basé sur le même taux de décroissance de masse de la particule liquide mère que celui proposé par Reinecke.

Dans un premier temps, nous rappelons les hypothèses faites par Chauvin et utilisées dans la suite du chapitre, sauf mention contraire. Le temps de fragmentation est celui proposé par Pilch et Erdmann (confère partie 2.1.5.2 page 64) [61], et le coefficient de

traînée est calculé grâce à la formule de Jourdan [49] :

$$\log_{10}(C_D) = -0.695 + 1.259 (\log_{10}(Re_p)) - 0.464 (\log_{10}(Re_p))^2 + 0.045 (\log_{10}(Re_p))^3 \quad (5.1)$$

5.1.1 Diagramme d'ondes (x,t) dans le tube à choc

Avant de nous intéresser à l'évolution de la pression relevée par les capteurs instantanés de pression (donc pour une position donnée), nous traçons les diagrammes d'ondes (x,t) (cf. Fig. 5.2) lorsqu'il n'y a pas de particule à gauche ; lorsque les particules sont solides (et ne peuvent donc pas se fragmenter) au milieu ; et lorsqu'elles sont liquides à droite :

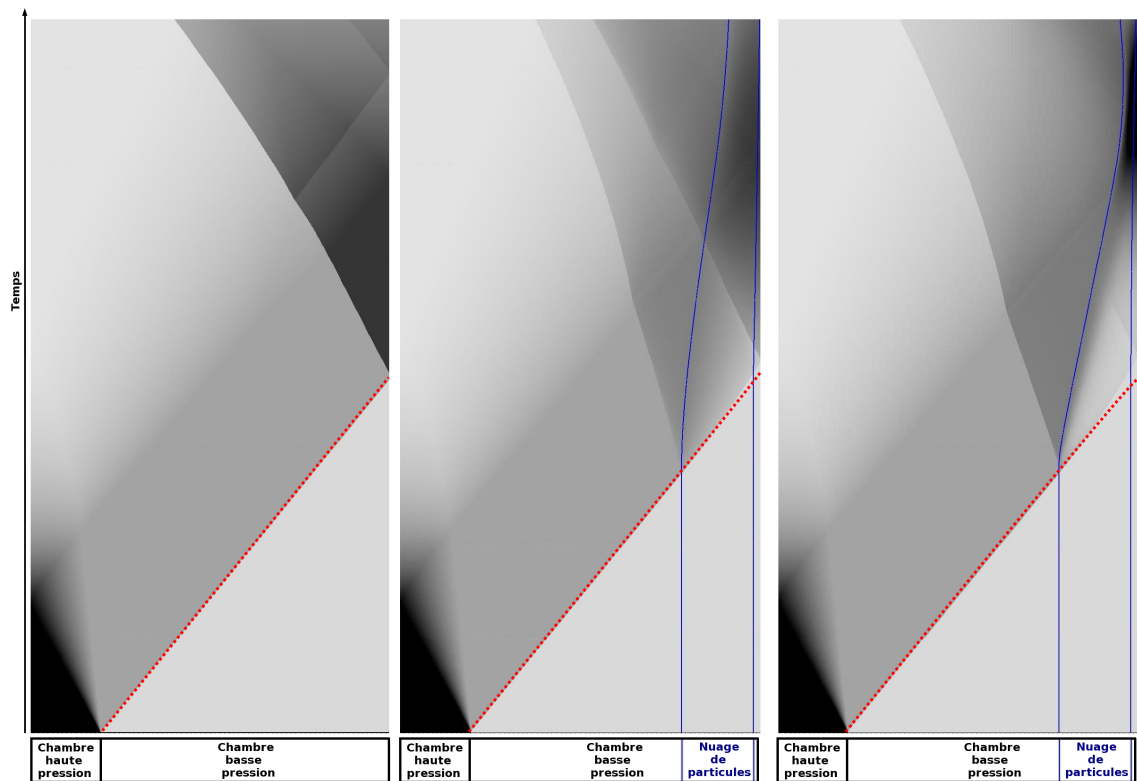


FIGURE 5.2 – Diagramme d'ondes (x,t) basé sur les résultats numériques du code SDFS : à gauche sans particule, au milieu avec des particules solides et à droite avec des particules liquides

Ces diagrammes représentent le champ de pression de la phase gazeuse dans un plan (x,t) . Plus le niveau de gris est intense, plus la pression est élevée. Ils permettent de visualiser la position des ondes de choc et de détente dans le tube au cours du temps. Nous traçons ci-après (cf. Fig. 5.3) le diagramme théorique (x,t) proposé par Chauvin pour les particules liquides.

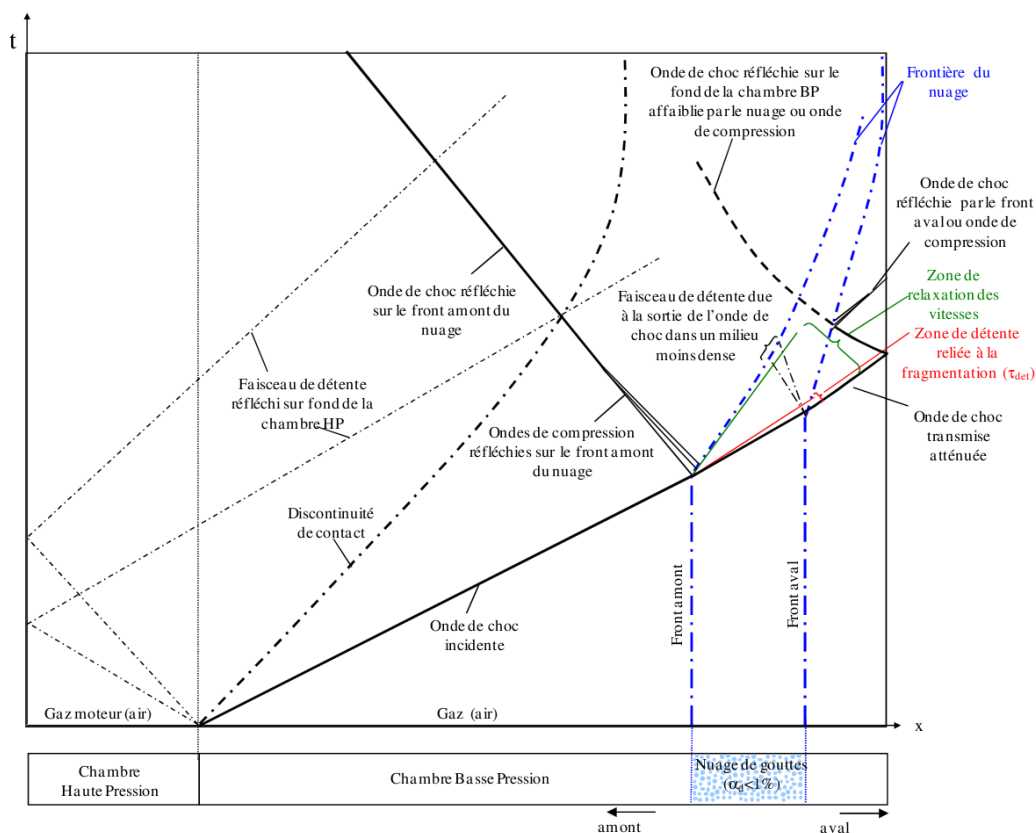


FIGURE 5.3 – Diagramme d'ondes (x,t) théorique proposé par Chauvin [13]

Sur le diagramme 5.2 à gauche (en l'absence de particule) nous observons la propagation des ondes et leurs rebonds sur les parois. Sur les diagrammes 5.2 au milieu et à droite, nous observons une déviation de l'onde incidente au niveau du nuage de particules, nuage représenté par des traits bleus. En effet, le trait rouge (correspondant au trajet de l'onde en l'absence de particule) et le trajet réel de l'onde ne sont plus superposés : cela s'explique par la présence des particules, laquelle change l'impédance Z du milieu.

En analysant les diagrammes obtenus avec des particules solides et avec des particules liquides, nous observons une zone plus claire correspondant à la zone dans laquelle les particules se mettent en mouvement. Cette zone est plus claire lorsque les particules fragmentent. Cela est cohérent puisqu'en fragmentant, leur inertie dynamique diminue et elles se mettent plus facilement à l'équilibre avec le fluide. Ainsi, elle absorbent une part plus importante de quantité de mouvement du fluide. Le diagramme obtenu dans le cas des particules liquides correspond à celui proposé par Chauvin, ce qui permet de valider partiellement les simulations réalisées. Dans la suite, nous étudierons l'évolution de la pression telle qu'elle est fournie par les capteurs de pression, c'est-à-dire pour une position donnée. Cela revient à faire une coupe à x fixé dans le diagramme précédent.

La position retenue est celle de la Station 5 de l'expérience d'Alice Chauvin, qui se situe à 3080 mm du bas du tube à choc.

5.1.2 Mise en évidence de trois états

Dans un premier temps, nous traçons (cf. Fig. 5.4) l'évolution de la pression pour des particules solides de différents diamètres : $1\mu m$, $50\mu m$, $100\mu m$, $250\mu m$ et $500\mu m$.

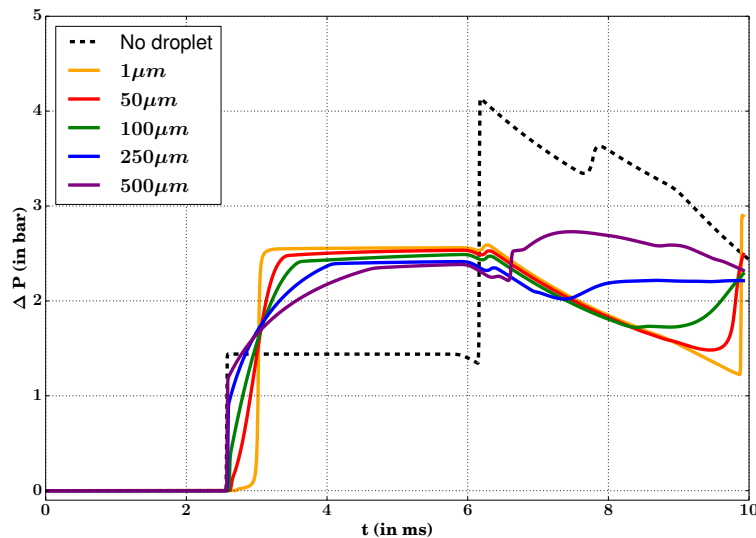


FIGURE 5.4 – Évolution de la pression en fonction du temps pour des particules solides de différents diamètres

Ce graphique nous permet d'envisager l'hypothèse suivante : la dépression observée lorsqu'une particule de $500\mu m$ se fragmente pour donner naissance à une particule de $100\mu m$ est due au passage d'une courbe de pression à l'autre. Dans le graphique 5.4 cela revient à passer de la courbe violette à la courbe verte.

Afin de valider ou d'infirmer cette hypothèse, nous utilisons le modèle à deux sections qui nous permet de fixer la taille et la vitesse des particules filles. Nous fixons la taille à $100\mu m$. La vitesse des particules filles est supposée identique à celle des particules mères. Nous traçons (cf. Fig. 5.5) l'évolution de la pression pour le modèle à deux sections utilisant la perte de masse proposée par Chauvin (NMC) et la perte de masse proposée par Reinecke (NMR). De plus, nous traçons l'évolution de la pression pour des particules solides de $500\mu m$ et $100\mu m$.

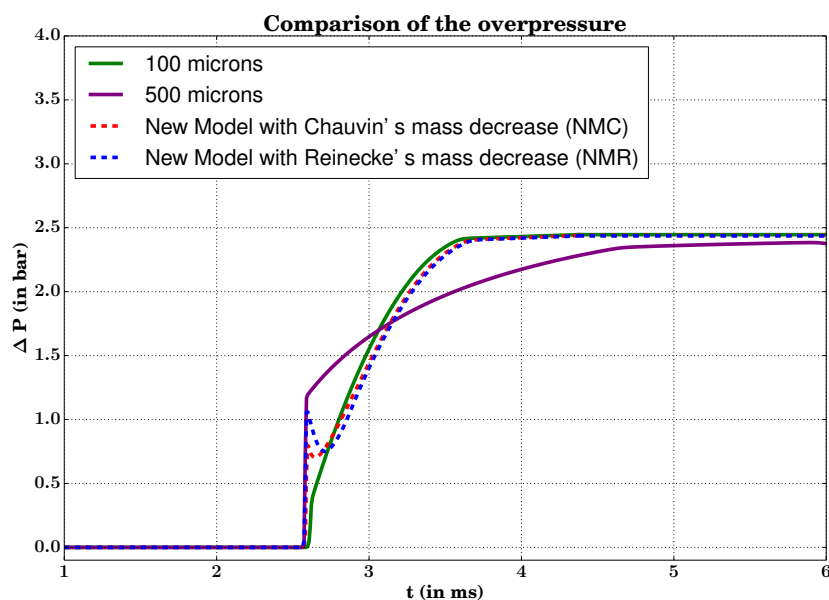


FIGURE 5.5 – Évolution de la pression en fonction du temps pour des particules solides de 100 et 500 microns et pour des particules liquides de 500 microns

L'hypothèse est validée. En effet, la montée en pression pour les particules liquides qui fragmentent est identique à celle des particules solides de 500 microns. Ensuite, la pression diminue pour rattraper la courbe de pression correspondant aux particules solides de 100 microns. Cette observation nous conduit à penser que le comportement asymptotique est piloté par les particules filles et non par les particules mères. Pour vérifier cette seconde hypothèse, nous traçons (cf. Fig. ??), en plus de la pression du fluide, la masse des particules mères et filles. Cette masse est adimensionnée par la masse initiale de particules mères. Nous comparons la pression et les masses obtenues pour des particules solides de 100 et 500 microns qui ne fragmentent pas et pour des particules liquides de 500 microns qui fragmentent. Les modèles NMC et NMR sont utilisés pour prendre en compte la fragmentation.

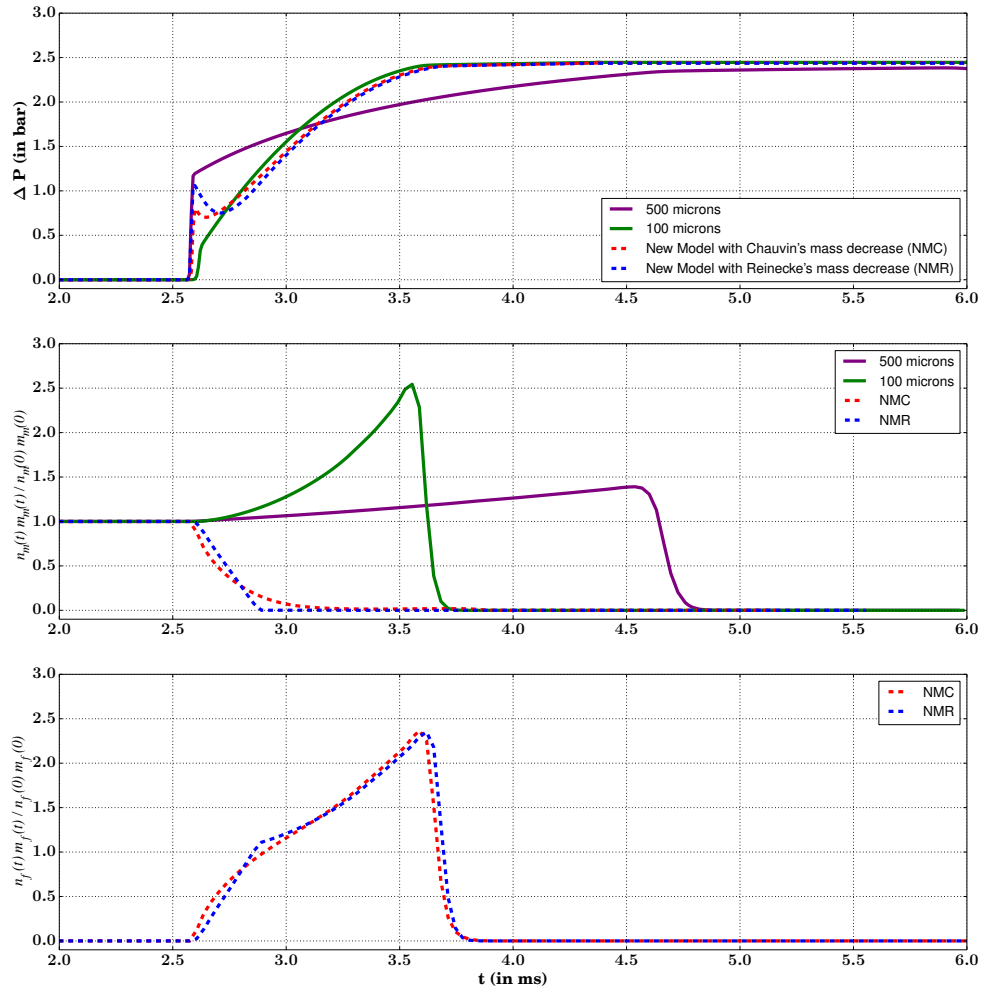


FIGURE 5.6 – Évolution de la pression et de la densité massique des particules mères et filles en fonction du temps pour des particules solides de 100 et 500 microns et pour des particules liquides de 500 microns

L'analyse de la densité massique permet d'apporter deux informations supplémentaires. Premièrement, le comportement asymptotique est atteint lorsqu'il n'y a plus de particule. De plus, il est entièrement caractérisé par les particules filles (leurs vitesses et leurs diamètres). En effet, en utilisant les modèles NMC ou NMR nous obtenons le même état asymptotique. La deuxième information concerne le minimum de la dépression : il correspond à l'intersection entre la courbe des masses mères et celle des masses filles. Pour confirmer cela, nous traçons sur un même graphe(cf. Fig. 5.7), l'évolution des masses des particules mères et filles :

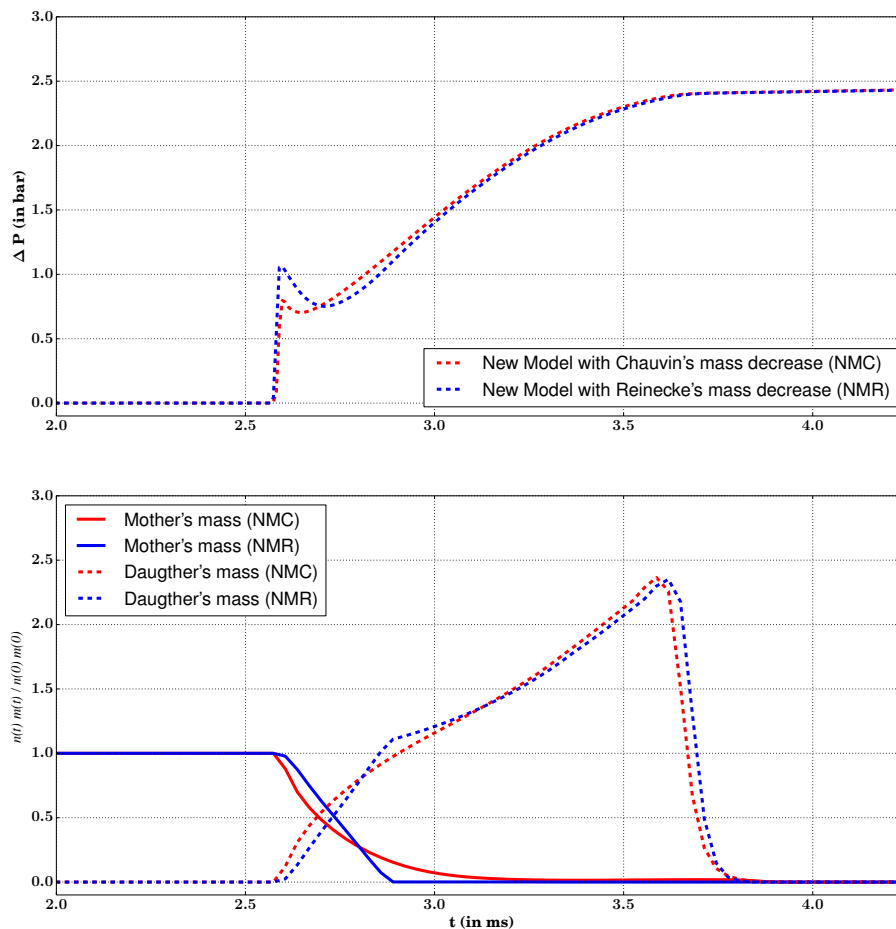


FIGURE 5.7 – Évolution de la pression et de la densité massique en fonction du temps pour des particules solides de 100 et 500 microns et pour des particules liquides de 500 microns

L'hypothèse est validée puisque la fin de la dépression correspond bien à l'intersection entre les deux courbes. Cela permet de diviser la courbe de pression en trois états : un premier état, piloté par les particules mères, dans lequel la pression augmente brutalement puis diminue. Un second état transitoire qui mène au dernier état : l'état asymptotique. Les deux derniers états étant quant à eux caractérisés par les particules filles.

5.1.3 Caractérisation de la pression asymptotique

Nous venons de voir que l'asymptote est caractérisée par les particules filles : leurs diamètres d_f et leurs vitesses v_f . Dans cette partie, nous allons déterminer quel est le

couple (d_f, v_f) correspondant le plus à l'expérience réalisée par Chauvin. Pour cela, nous utiliserons le modèle NMR. Dans un premier temps, nous faisons varier les paramètres séparément afin d'étudier leurs influences respectives. Sur la figure 5.8 nous étudions l'influence du diamètre d_f sur le comportement asymptotique. Pour cela, nous fixons la vitesse des particules filles v_f et nous faisons varier le diamètre :

- en haut la vitesse des particules filles est égale à celle des particules mères $v_f = v_m$
- en bas la vitesse des particules filles est égale à la vitesse du fluide $v_f = u_f$
- la vitesse des particules filles est une moyenne entre les deux vitesses : $v_f = (v_m + u_f)/2$

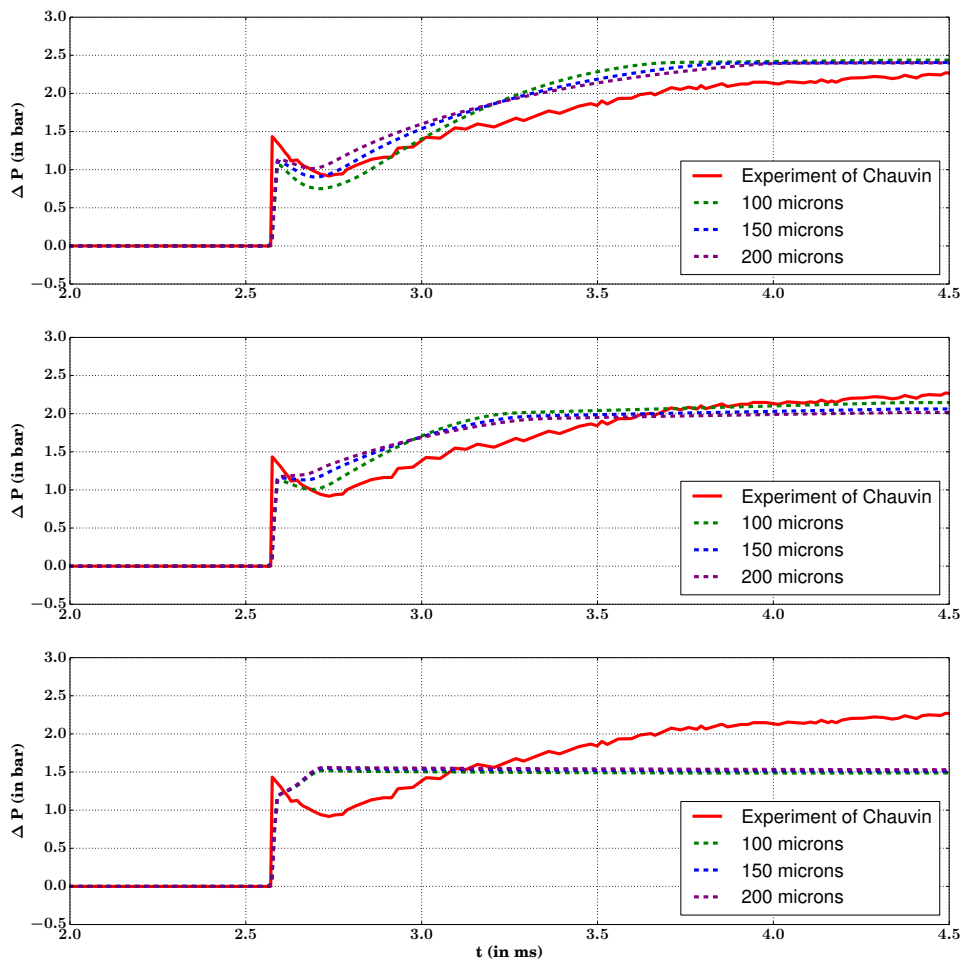


FIGURE 5.8 – Évolution de la pression en fonction du temps pour différents diamètres et différentes vitesses : en haut $v_f = v_m$, au milieu $v_f = (v_m + u_f)/2$, en bas $v_f = u_f$

Nous fixons ensuite le diamètre des particules filles et nous faisons varier la vitesse des particules filles (cf Fig 5.9)

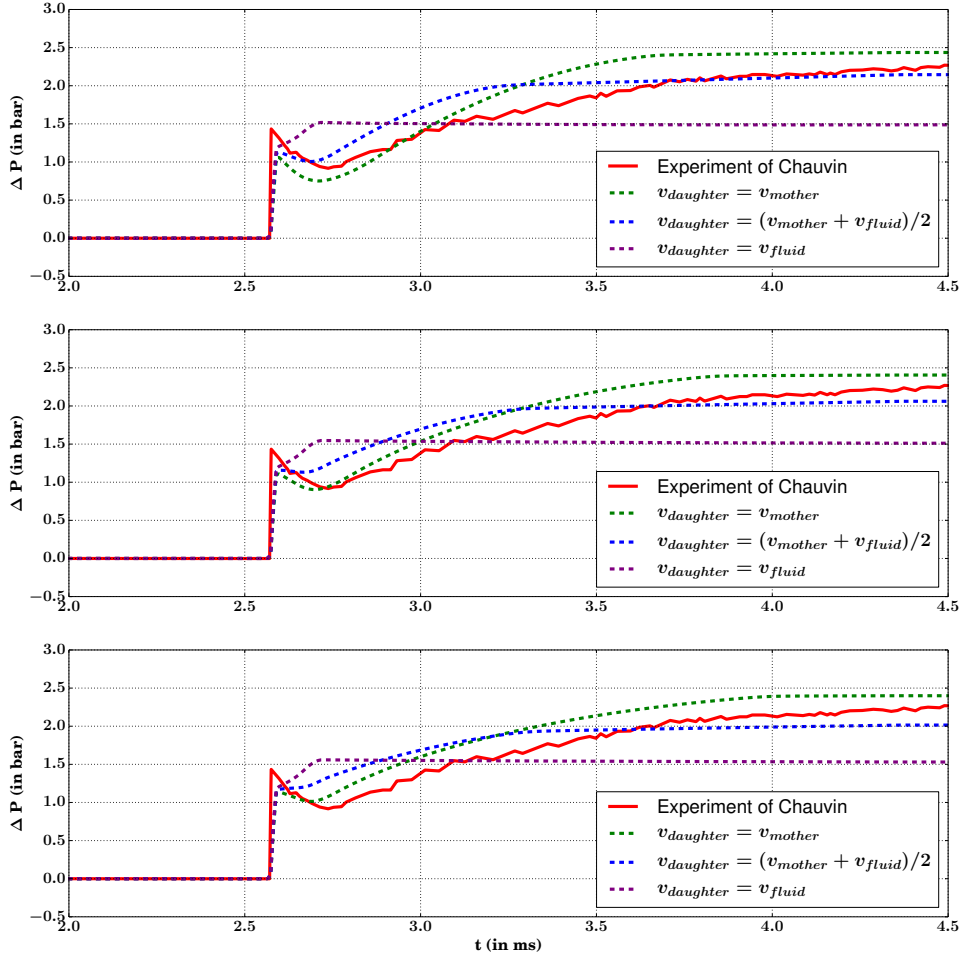


FIGURE 5.9 – Évolution de la pression en fonction du temps pour différentes vitesses et différents diamètres : en haut $d_f = 100\mu m$, au milieu $d_f = 150\mu m$, en bas $d_f = 200\mu m$

Les figures 5.9 et 5.8 permettent d'affirmer que l'état asymptotique dépend principalement de la vitesse des particules filles. Introduisons alors α_v défini comme suit :

$$v_f = v_m + \alpha_v (u_f - v_m) \quad (5.2)$$

Remarque : si $\alpha_v > 0$, il faut rajouter un terme source dans les équations du fluide pour prendre en compte la variation de quantité de mouvement des particules.

Nous cherchons alors la valeur de α_v qui permet de restituer le comportement asymptotique observé dans l'expérience. Pour cela, nous fixons arbitrairement le diamètre des

particules filles à $150\mu m$ et nous faisons varier le paramètre α_v . La valeur optimale de α_v obtenue vaut 0.25. Plusieurs inconnues restent à déterminer :

- la taille des particules filles,
- le choix entre les modèles NMC et NMR,
- la taille finale des particules mères après fragmentation.

Nous comparons (cf. Fig. 5.10) les pressions obtenues en faisant varier le diamètre des particules mères après fragmentation. Pour cela, nous utilisons le modèle NMC. Nous traçons aussi les résultats obtenus avec le modèle NMR (qui impose un diamètre nul pour les particules mères après fragmentation).

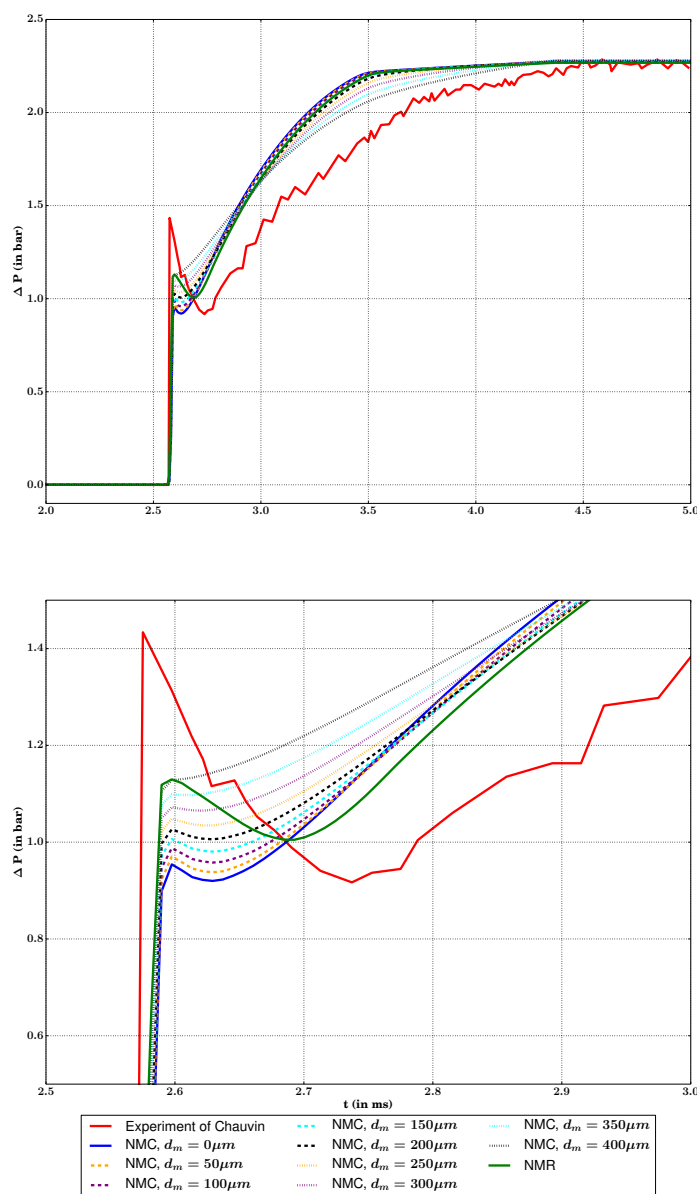


FIGURE 5.10 – Évolution de la pression en fonction du temps : étude de l'influence du diamètre des particules mères après fragmentation

Le modèle NMR semble beaucoup plus approprié que le modèle NMC et ce quel que soit le diamètre des particules mères après fragmentation. C'est donc le modèle retenu pour la suite de l'étude. Il ne reste plus que le diamètre des particules filles à calibrer. Pour cela, nous imposons la valeur de $\alpha_v = 0.25$ et nous traçons la pression pour plusieurs diamètres. Le diamètre $d_f = 100\mu m$ semble le plus proche de l'expérience de Chauvin même si son comportement asymptotique est légèrement supérieur à celui observé. Afin

de pallier ce problème, nous augmentons la valeur de α_v à 0.35. La pression obtenue est alors la suivante (cf. Fig. 5.11) :

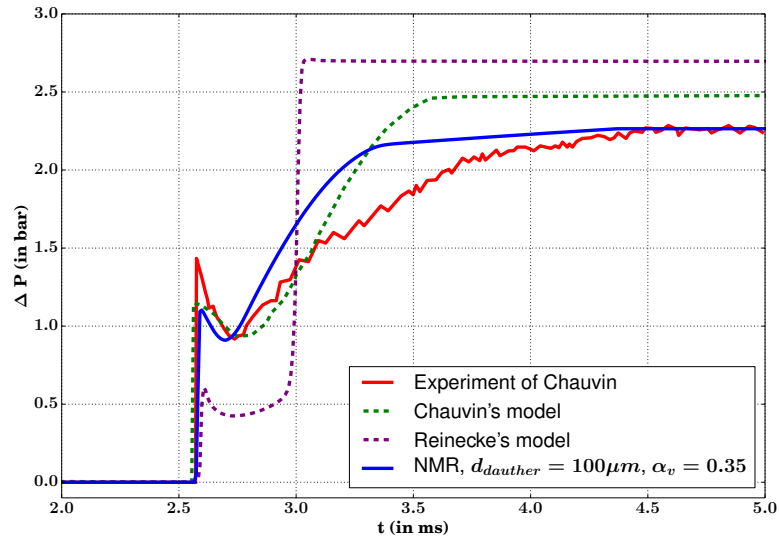


FIGURE 5.11 – Évolution de la pression en fonction du temps : étude de l'influence du diamètre des particules filles

Le modèle ainsi construit permet de capturer à la fois la dépression présente au début de la fragmentation et le comportement asymptotique. Néanmoins, il ne permet pas de restituer la phase transitoire. Pour améliorer le modèle, nous étudions l'influence du temps de fragmentation et du coefficient de traînée des particules.

5.1.4 Pistes d'amélioration du modèle

Dans un premier temps, nous analysons l'influence du temps de fragmentation τ_{frag} . Pour cela nous considérons les trois temps de fragmentation suivant :

- $\tau_{frag} = \tau_{Pilch}$,
- $\tau_{frag} = 2\tau_{Pilch}$,
- $\tau_{frag} = 0.5\tau_{Pilch}$.

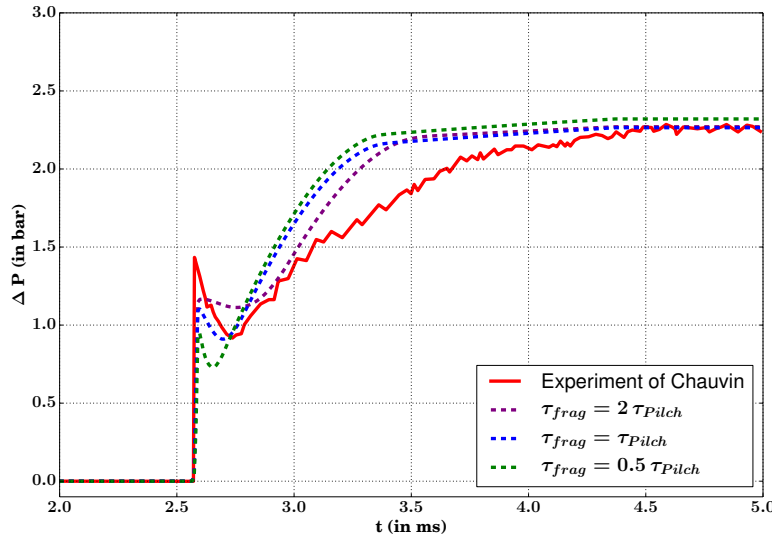


FIGURE 5.12 – Évolution de la pression en fonction du temps : étude de l'influence du temps de fragmentation

Au regard des courbes de la figure 5.12, il ne nous paraît pas pertinent de modifier le temps de fragmentation. Dans un second temps, nous étudions l'influence du coefficient de traînée des particules. Pour cela, nous utilisons les quatre coefficients de traînée suivant :

- $C_D = C_D^{Chauvin}$,
- $C_D = 0.5 C_D^{Chauvin}$,
- $C_D = 2 C_D^{Chauvin}$,
- $C_D = C_D^{Eq.(5.3)}$.

où $C_D^{Eq.(5.3)}$ est le coefficient de traînée défini précédemment (confère partie 2.1.1.2 page 48) dont nous rappelons l'expression :

$$C_D = \begin{cases} \text{Pour } Ma_p < 0.6 & : C_D^1 = \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15 Re_p^{0.687}) + \frac{0.42}{1 + 42500 Re_p^{-1.16}} \\ \text{Pour } Ma_p > 1.3 & : C_D^2 = 1.0 + 4.66 Re_p^{-0.5} \\ \text{Pour } M_p \in [0.6, 1.3] & : C_D^1 + \frac{7}{10} (Ma_p - 0.6) (C_D^2 - C_D^1) \end{cases} \quad (5.3)$$

La courbe de pression correspondant au coefficient de traînée $C_D = C_D^{Eq.(5.3)}$ restitue mieux le comportement transitoire observé expérimentalement (cf. Fig. 5.13).

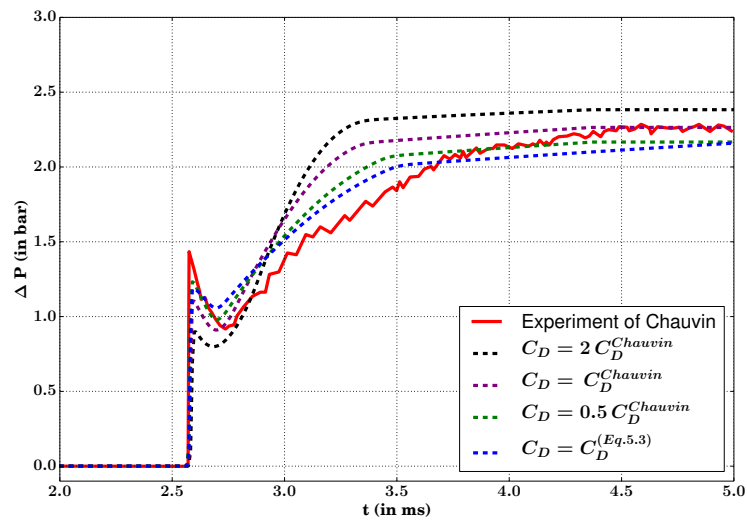


FIGURE 5.13 – Influence du coefficient de traînée sur l'évolution de la pression

Nous avons alors cherché le nouveau couple optimal (d_f, α_v) correspondant à ce coefficient de traînée. Pour cela, nous avons fait varier les diamètres et vitesses des particules filles autour de $(d_f = 100\mu m, \alpha_v = 0.35)$: nous avons effectué 187 simulations pour des diamètres compris entre $60\mu m$ et $140\mu m$ et des coefficients α_v allant de 0 à 0.5. Le pas de discrétisation vaut respectivement $5\mu m$ pour le diamètre et 0.05 pour les vitesses. Le couple optimal est $(d_f = 75\mu m, \alpha_v = 0.25)$. La courbe de pression obtenue est alors la suivante :

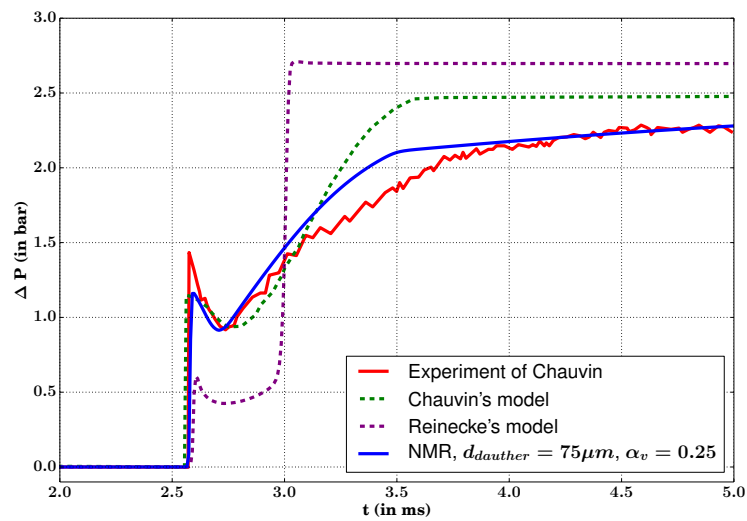


FIGURE 5.14 – Évolution de la pression en fonction du temps pour le couple $(d_f = 75\mu m, \alpha_v = 0.25)$ et $C_D = C_D^{Eq.(5.3)}$

L'accord est meilleur mais pas encore totalement satisfaisant. Mais étant donné la fraction volumique relativement élevée de particules ($\alpha_p = 0.0105$), des effets d'interaction entre particules peuvent apparaître, rendant le coefficient de traînée effectif plus faible que celui calculé théoriquement. Pour analyser l'influence de ce phénomène, nous avons effectué des simulations complémentaires en faisant varier le coefficient de traînée. Pour cela nous introduisons β_{C_D} :

$$C_D = \beta_{C_D} C_D^{Eq.(5.3)} \quad (5.4)$$

Nous faisons varier β_{C_D} entre zéro et un. Pour chaque valeur de β_{C_D} , nous cherchons le meilleur couple (d_f, α_v) en effectuant l'optimisation sur les 187 simulations telles que décrites précédemment. Dans le tableau 5.1, nous décrivons les couples trouvés.

β_{C_D}	d_f (en μm)	α_v
1.0	75	0.25
0.9	100	0.0
0.8	95	0.0
0.7	90	0.0
0.6	80	0.0
0.5	80	0.0
0.4	70	0.0
0.3	Pas de solution valable	
0.2	Pas de solution valable	
0.1	Pas de solution valable	
0.0	Pas de solution valable	

TABLE 5.1 – Couples (d_f, α_v) idéaux correspondant aux différents coefficients de traînée

Lorsque le coefficient β_{C_D} est inférieur à 0.4, il n'y a aucun couple qui permet de restituer correctement la courbe de pression expérimentale. A l'inverse, le triplet $(\beta_{C_D} = 0.5, d_f = 80\mu m, \alpha_v = 0)$ offre une bonne approximation de la courbe expérimentale. Ci-dessous, nous représentons la courbe de pression correspondant à ce triplet (cf. Fig. 5.15).

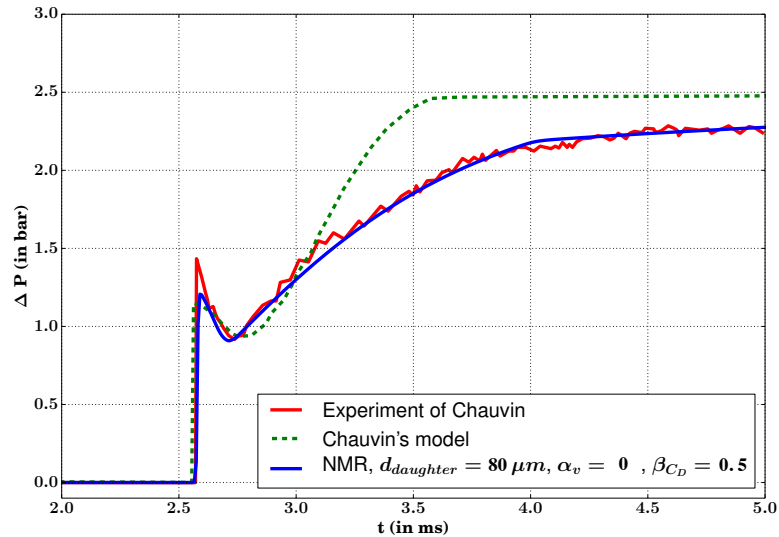


FIGURE 5.15 – Évolution de la pression en fonction du temps pour le triplet ($\beta_{CD} = 0.5, d_f = 80\mu m, \alpha_v = 0$)

La courbe permet de restituer le comportement observé expérimentalement avec une grande fidélité. Afin de vérifier que ces tests, purement numériques, ne sont pas incohérents avec les résultats issus de la littérature, nous comparons le diamètre des particules filles que nous avons trouvé à ceux calculés par Chauvin [11]. Chauvin utilise deux formules permettant de calculer deux diamètres : $108\mu m$ et $47\mu m$. La valeur que nous avons obtenue est donc cohérente avec celles proposées par Chauvin. Cette vérification, ainsi que la courbe de pression obtenue précédemment, nous permettent de penser que ces résultats restituent l'expérience proposée par Chauvin. Néanmoins, les phénomènes mis en jeu étant complexes et fortement liés, des effets peuvent se compenser. Étant donné que nous ne disposons que d'une observable globale, nous ne sommes pas en mesure de déterminer plus précisément l'influence de chaque paramètre.

5.2 Expérience de Boeing

5.2.1 Présentation de l'expérience

Notre deuxième cas d'application est celui d'une expérience réalisée à la soufflerie hypersonique de Boeing dans les années 1970 [17, 25]. Cette expérience étudie le comportement d'un brouillard de particules solides qui s'écoule à Mach 6.1 autour d'une sphère. Les particules ont un diamètre de $100\mu m$ et sont en silice. La sphère mesure 3 pouces de diamètre ($= 7.62cm$) et elle est constituée d'un alliage de titane (Ti-6Al-4V). La figure 5.16 représente le schéma de l'expérience.

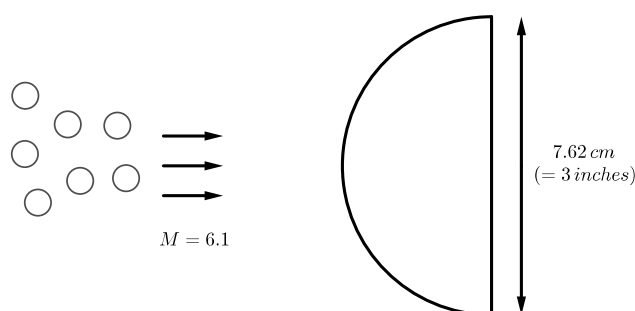


FIGURE 5.16 – Description de l'expérience réalisée à Boeing

Les conditions amont de la soufflerie (stagnation conditions) ainsi que les conditions aval sont rappelées dans le tableau ci-dessous 5.2.

	Conditions amont	Conditions aval
Pression (en Pa)	$44,8 \cdot 10^5$	2564
Température (en K)	633,1	75
Densité (en $kg.m^{-3}$)	24,6	0,12
Vitesse du son (en $m.s^{-1}$)	504,4	173,6

TABLE 5.2 – Caractéristiques de l'expérience de Boeing

Le flux massique de particules \dot{m}_p est donné par la relation suivante :

$$\frac{\dot{m}_p}{\dot{m}_f} = 7.3 \cdot 10^{-4} \quad (5.5)$$

En supposant que les particules sont à l'équilibre dynamique avec le fluide à l'entrée de la veine d'essai, il est possible de calculer la fraction volumique de particules α_p :

$$\frac{\alpha_p \rho_p}{\rho_f} = 7.3 \cdot 10^{-4} \Rightarrow \alpha_p = 3.28 \cdot 10^{-8} \quad (5.6)$$

Malgré la faible fraction volumique, il a été observé une importante déformation du choc, plus particulièrement au niveau de l'axe de symétrie (cf. Fig.5.17).

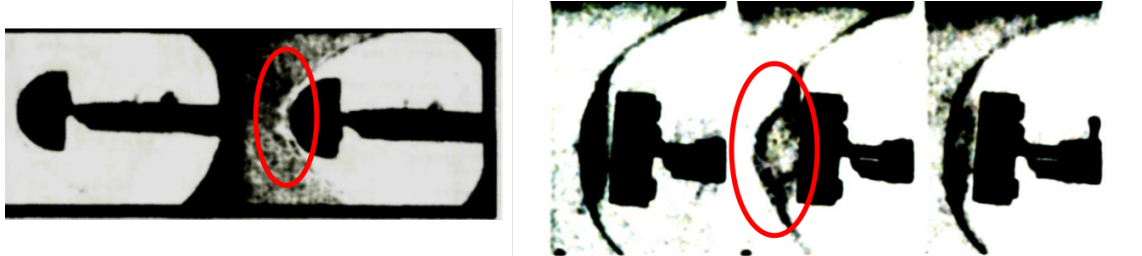


FIGURE 5.17 – Observation expérimentale de la déformation du choc due à la présence de particules : [17] (à gauche) et [25] (à droite)

5.2.2 Présentation des travaux de Hulin et Znaty [44]

Quelques années plus tard, Hulin et Znaty [44] utilisent la simulation numérique avec une approche Lagrangienne-Eulérienne pour reproduire cette expérience. Ils obtiennent eux aussi une déformation importante du choc, similaire à celle observée expérimentalement (cf. Fig.5.18)

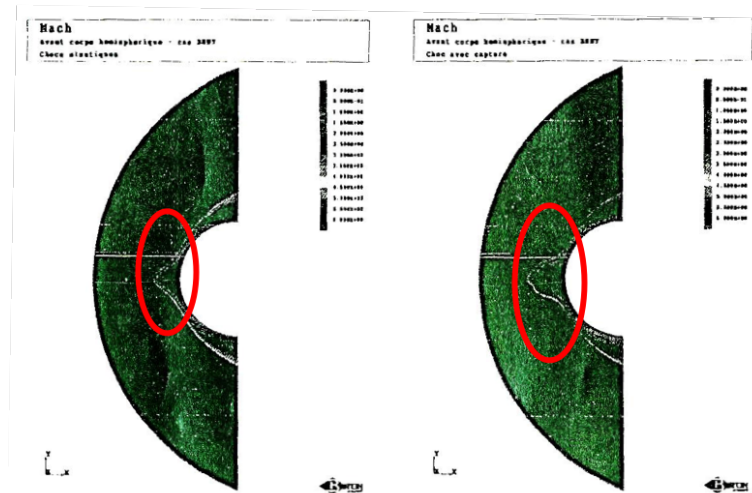


FIGURE 5.18 – Résultats de simulations effectuées par Hulin et Znaty [44]

Pour reproduire l'interaction des particules avec la paroi et l'érosion de la paroi, ils proposent les hypothèses suivantes :

- chaque particule qui impacte sur la paroi se fragmente en cinq particules de même taille réémises depuis la paroi,
- l'érosion de la paroi est modélisée par l'injection de nouvelles particules *via* un facteur de gain G_{Hu} , défini par :

$$G_{Hu} = \frac{\dot{m}_e}{\dot{m}_i} \quad (5.7)$$

où \dot{m}_i et \dot{m}_e désignent respectivement le débit massique impactant et le débit massique des particules émises. Hulin et Znaty proposent de prendre (arbitrairement) $G_{Hu} = 4$,

- l'énergie cinétique totale de toutes les particules émises depuis la paroi (issues de la fragmentation des particules impactantes et de l'érosion) représente 30% de l'énergie cinétique totale des particules impactantes.

Hulin et Znaty supposent de plus que les particules agissent sur la production de turbulence du fluide. Ils utilisent le modèle (k, ϵ) auquel ils ajoutent un terme source $\mathbf{S}_{\rho\mathbf{k}}$ aux équations sur k et ϵ . Ce terme correspond au travail de la force de traînée dans le repère local lié au fluide et a pour expression, pour une cellule c donnée du maillage :

$$\mathbf{S}_{\rho\mathbf{k}} = \frac{1}{Vol(c)} \sum_{l=1}^{N_c} w_l \mathbf{F}_l (\widetilde{\mathbf{u}}_{\mathbf{f}} - \mathbf{v}_l) \quad (5.8)$$

où w_l représente le poids numérique par particule (c'est-à-dire le nombre de particules réelles associées à la particule numérique l), N_c le nombre de particules numériques dans la cellule considérée, \mathbf{F}_l la force de traînée agissant sur la particule l , \mathbf{v}_l sa vitesse et $\overline{\mathbf{u}}_{\mathbf{f}}$ la vitesse moyenne de Favre du fluide dans la cellule considérée, dont nous rappelons la définition :

$$\widetilde{\mathbf{u}}_{\mathbf{f}} = \frac{\overline{\rho_f \mathbf{u}_{\mathbf{f}}}}{\overline{\rho_f}} \quad (5.9)$$

L'injection uniforme et en continu de particules numériques représentant chacune une particule réelle menant à une concentration beaucoup plus importante que celle utilisée dans l'expérience, Hulin et Znaty utilisent deux modes d'injection :

- dans le premier cas, ils injectent à chaque pas de temps des particules avec un poids numérique < 1 .
- dans le second cas, ils injectent des particules avec un poids numérique de 1 mais ne les injectent pas à tous les pas de temps.

5.2.3 Reproduction des travaux de Hulin et Znaty [44]

Le premier type d'injection se rapprochant fortement d'une modélisation Euler-Euler (où la phase particulaire est assimilée à une phase continue localement et dont nous ne connaissons que que les propriétés moyennes), nous avons voulu vérifier si nous pouvions reproduire les résultats de Hulin et Znaty avec le code SDFS. Les valeurs proposées par Hulin et Znaty pour les différents paramètres du modèle d'interaction particules-paroi n'ayant pas de justification dans leur article, nous avons cherché à les vérifier. Pour cela, des simulations de l'impact d'une bille de silice sur un mur d'alliage de titane (Ti-6Al-4V) ont été faites avec le code d'hydrodynamique HESIONE [4] du CEA. Ci-dessous nous représentons les figures issues de cette simulation (cf. Fig. 5.19).

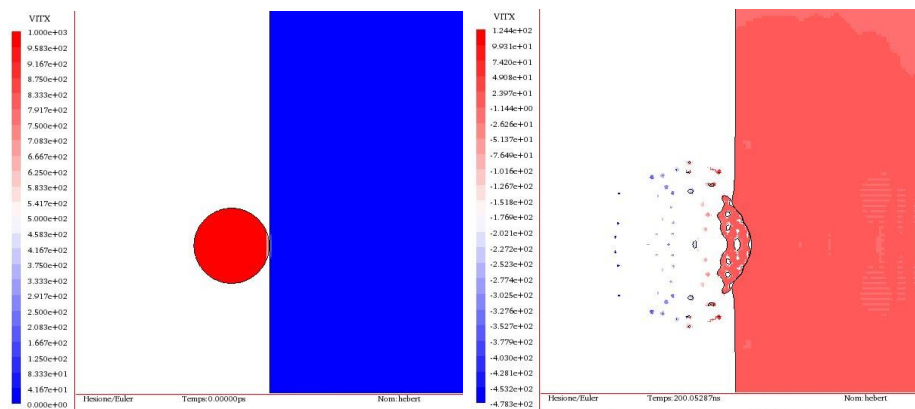


FIGURE 5.19 – Impact d'une bille de silice sur un mur d'alliage de titane (Ti-6Al-4V), $t = 0$ (à gauche), $t = 200ns$ (à droite)

La vitesse massique moyenne des fragments après rebond a été extraite des résultats du calcul (cf. Fig . 5.20). Comme nous pouvons le constater, la vitesse des particules après rebond se situe aux alentours de $-100 m/s$, ce qui correspond à un coefficient de restitution normal de 0.1. Par soucis de simplicité et en l'absence de données plus précises, nous avons donc fait l'hypothèse $\epsilon_t = \epsilon_n = \epsilon_{tot} = 0.1$.

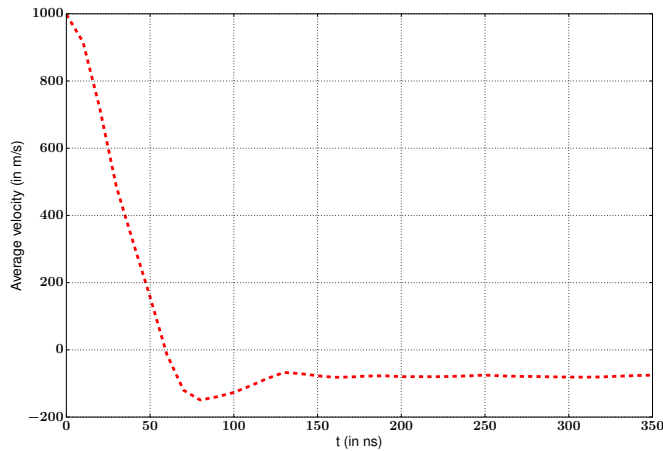


FIGURE 5.20 – Évolution de la vitesse massique moyenne des particules en fonction du temps

La simulation ne permettant pas de modéliser la perte de masse de la paroi due à l'érosion, les paramètres F et G définis à la page 58 du chapitre 2 ont été fixés sur la base du modèle proposé par Hulin et Znaty, soit : $G = 5$ et $F = 25$. De plus, ne disposant d'aucune donnée sur les transferts thermiques durant l'impact, nous avons supposé : $H = 1$. Nous récapitulons dans le tableau ci-dessous (cf. Tab 5.3) la valeur des paramètres utilisés dans la simulation :

Paramètres	G	F	ϵ_n	ϵ_t	H
Valeurs	5	25	0.1	0.1	1

TABLE 5.3 – Valeurs des paramètres permettant de modéliser le comportement des particules à la paroi et l'érosion de la paroi

Pour la modélisation de la turbulence, nous avons repris le modèle proposé par Hulin et Znaty :

$$\mathbf{S}_{\rho \mathbf{k}} = \sum_{l=1}^N n_l \mathbf{F}_1(\widetilde{\mathbf{u}}_f - \mathbf{v}_1) \quad (5.10)$$

Tout comme Hulin et Znaty, nous observons une déformation instationnaire du choc. Elle est créée au niveau de la ligne d'arrêt, se propage ensuite le long du choc et enfin est évacuée vers l'aval. Ce phénomène s'observe de façon périodique. Nous avons tracé ci-dessous (cf. Fig. 5.21 à 5.29) le gradient de densité du fluide (à gauche), l'énergie cinétique turbulente (au milieu) et la concentration massique des particules (incidentes et réémises réunies) adimensionnée par la concentration massique des particules à l'infini amont. Nous avons tracé des instantanés à différents moments de la simulation.

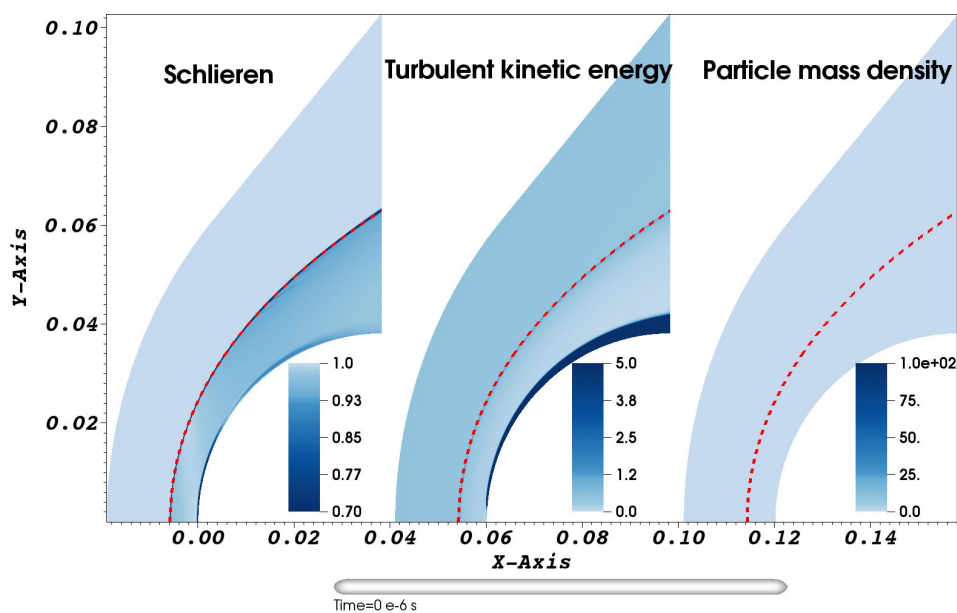


FIGURE 5.21 – Gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 0$

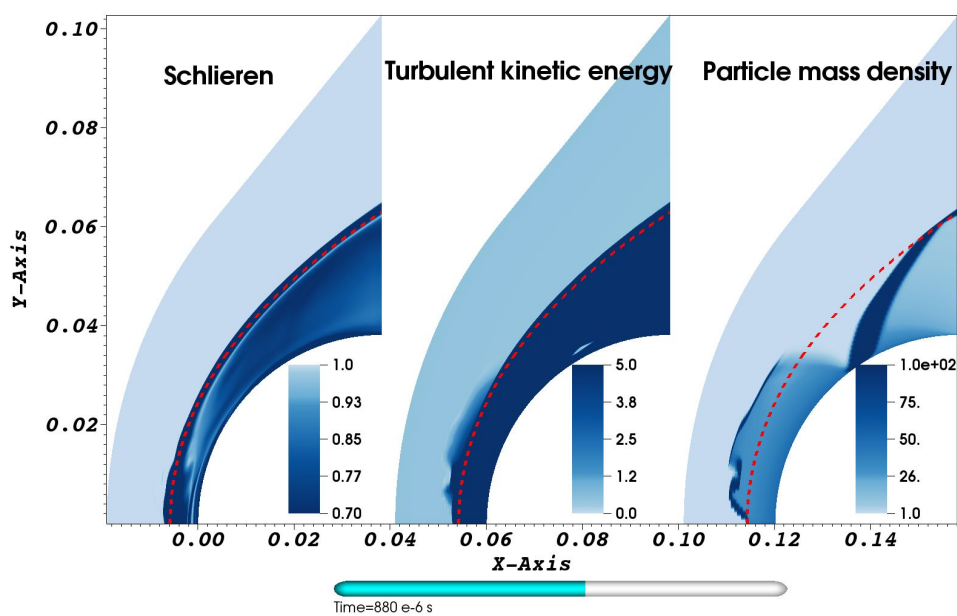


FIGURE 5.22 – Gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 880\mu s$

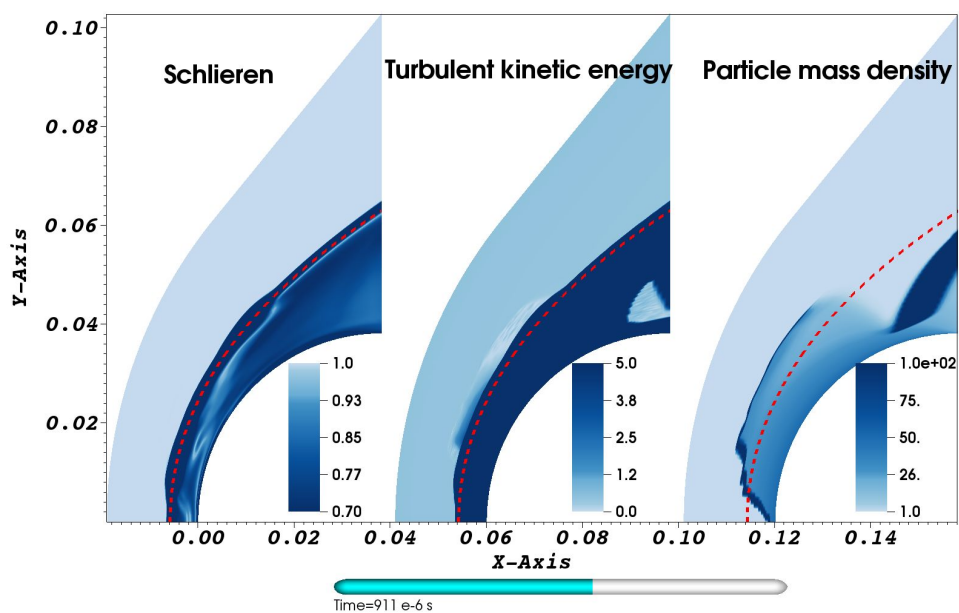


FIGURE 5.23 – Gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 911 \mu s$

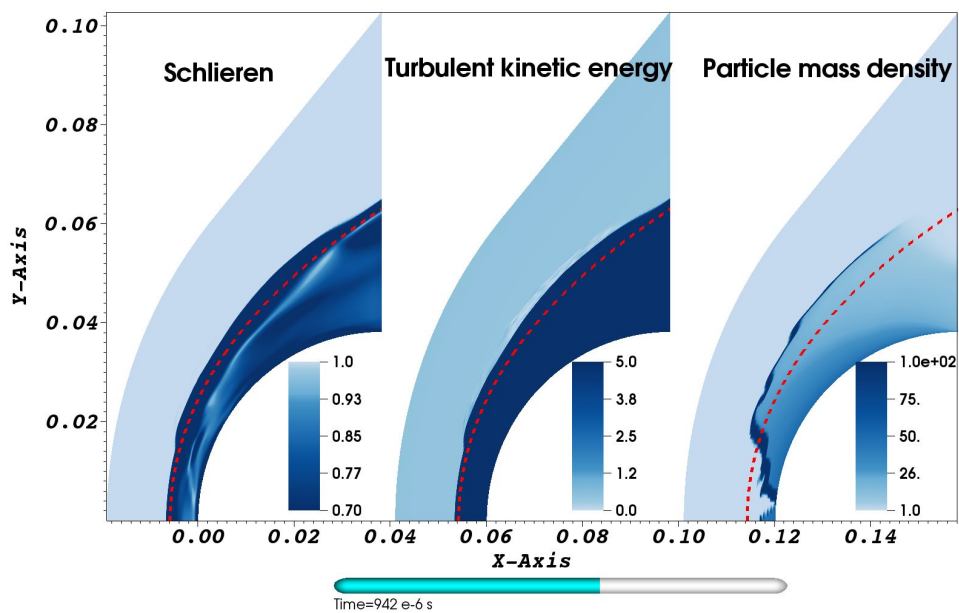


FIGURE 5.24 – Gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 942 \mu s$

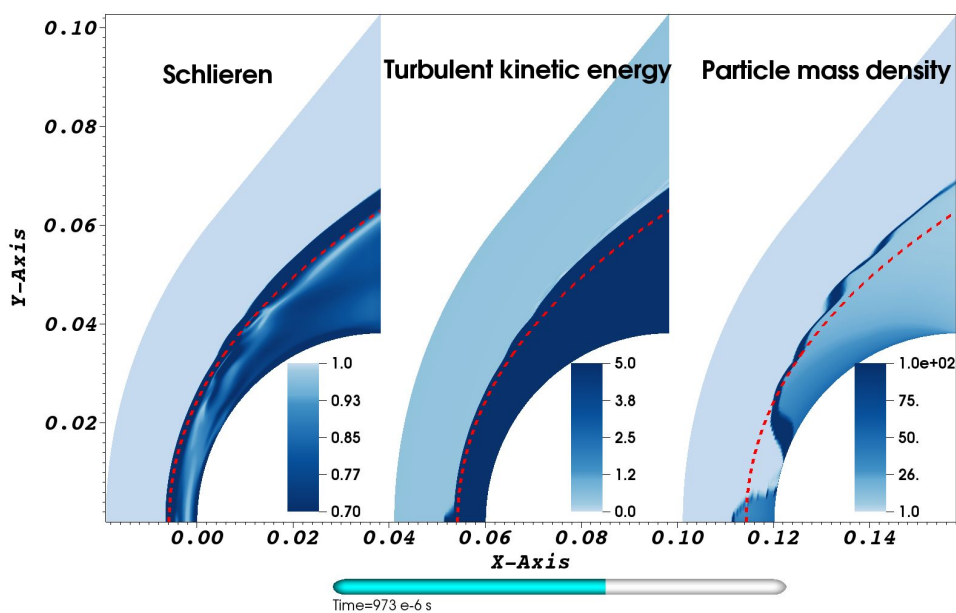


FIGURE 5.25 – Gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 973 \mu\text{s}$

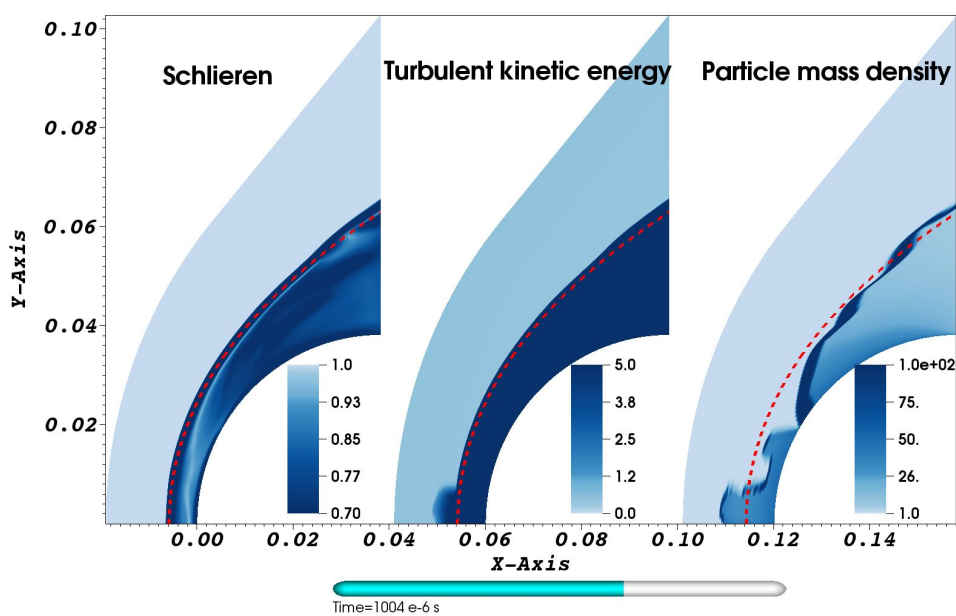


FIGURE 5.26 – Gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 1004 \mu\text{s}$

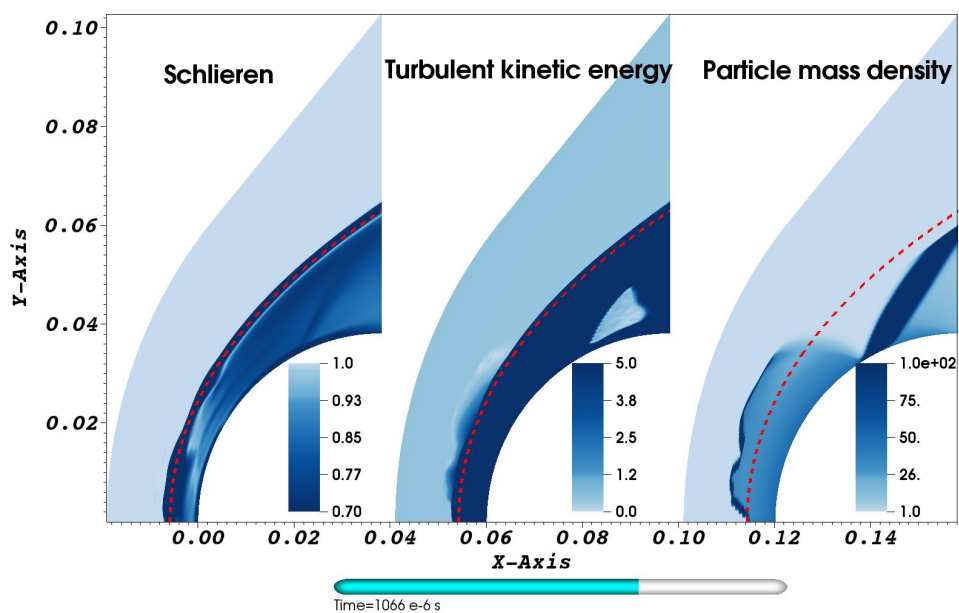


FIGURE 5.27 – Gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 1066 \mu\text{s}$

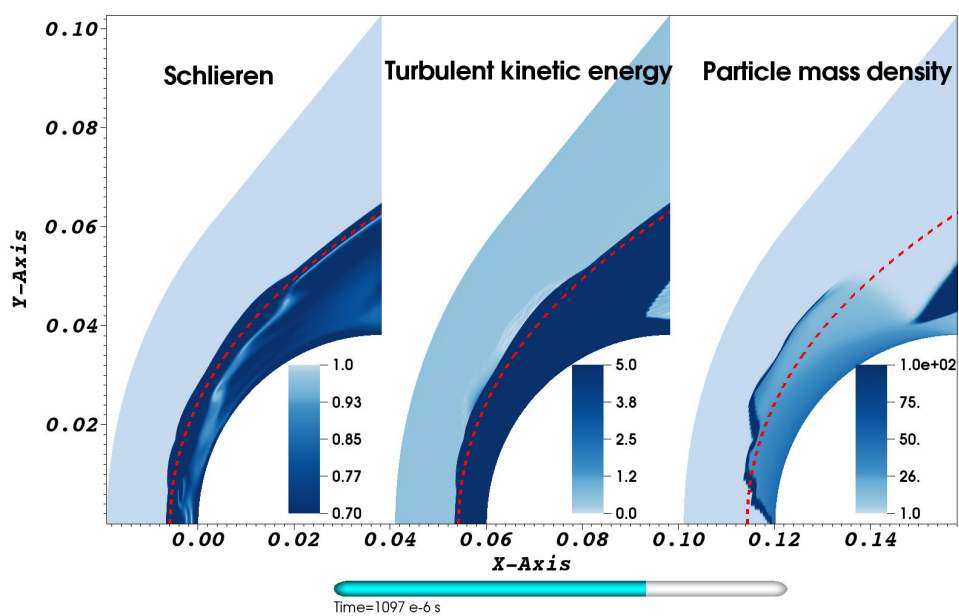


FIGURE 5.28 – Gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 1097 \mu\text{s}$

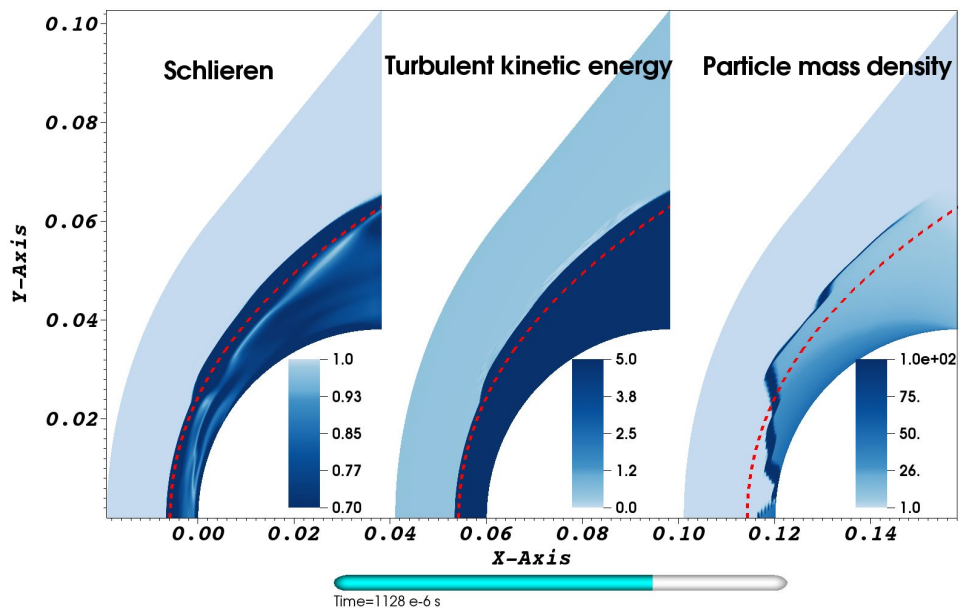
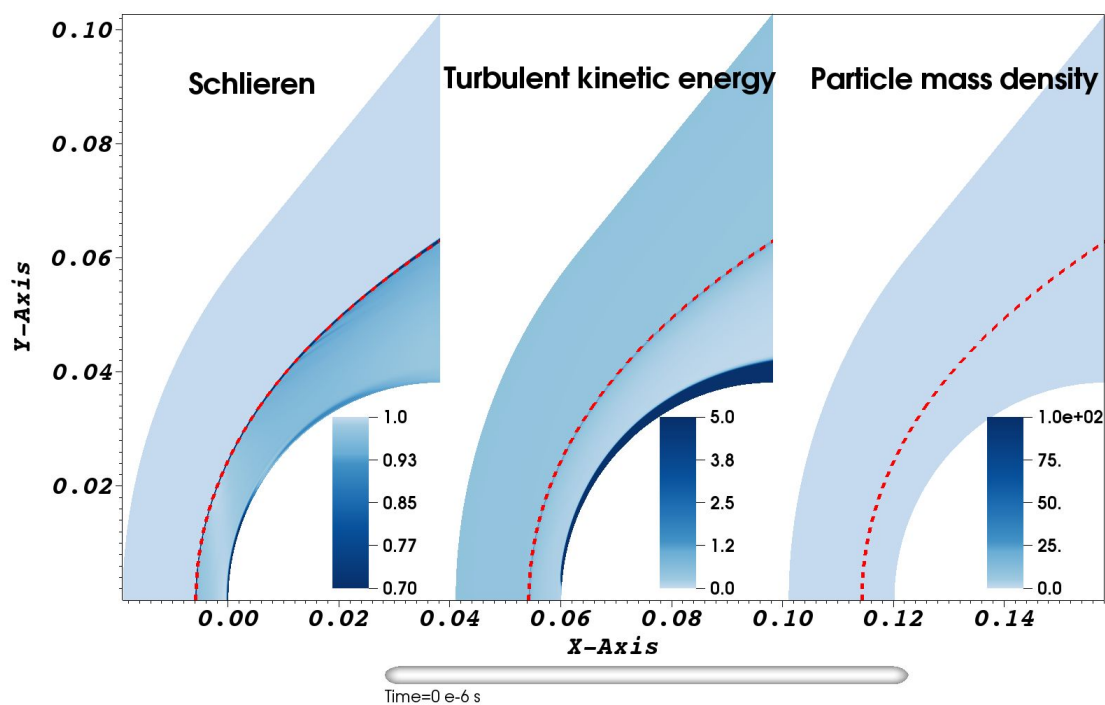
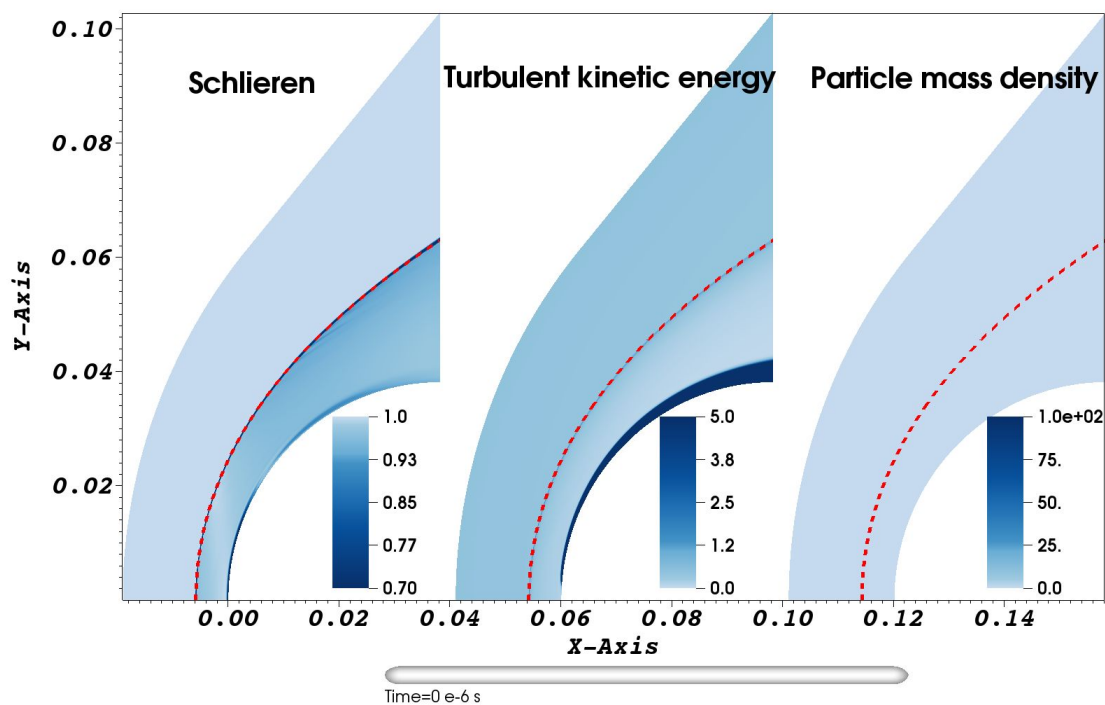


FIGURE 5.29 – Gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 1128 \mu\text{s}$

Comme nous pouvons le constater sur les différentes figures, il y a une forte accumulation des particules qui peut atteindre une centaine de fois la concentration présente à l'infini amont, compte tenu du modèle adopté. Cette surconcentration entraîne une forte production de turbulence très localisée, qui est à l'origine de la déformation du choc. Les particules sont ensuite transportées le long du choc, ce qui explique la propagation de la déformation. Afin de vérifier que la déformation du choc est bien une conséquence de la modification de la turbulence par les particules, nous traçons, aux mêmes instants, les mêmes quantités (gradient de densité du fluide, énergie cinétique turbulente et concentration massique des particules) en supposant cette fois que les particules n'ont pas d'influence sur la turbulence du fluide (cf. Fig. 5.30 à 5.38). Dans cette configuration, nous n'observons pas de déformation du choc.

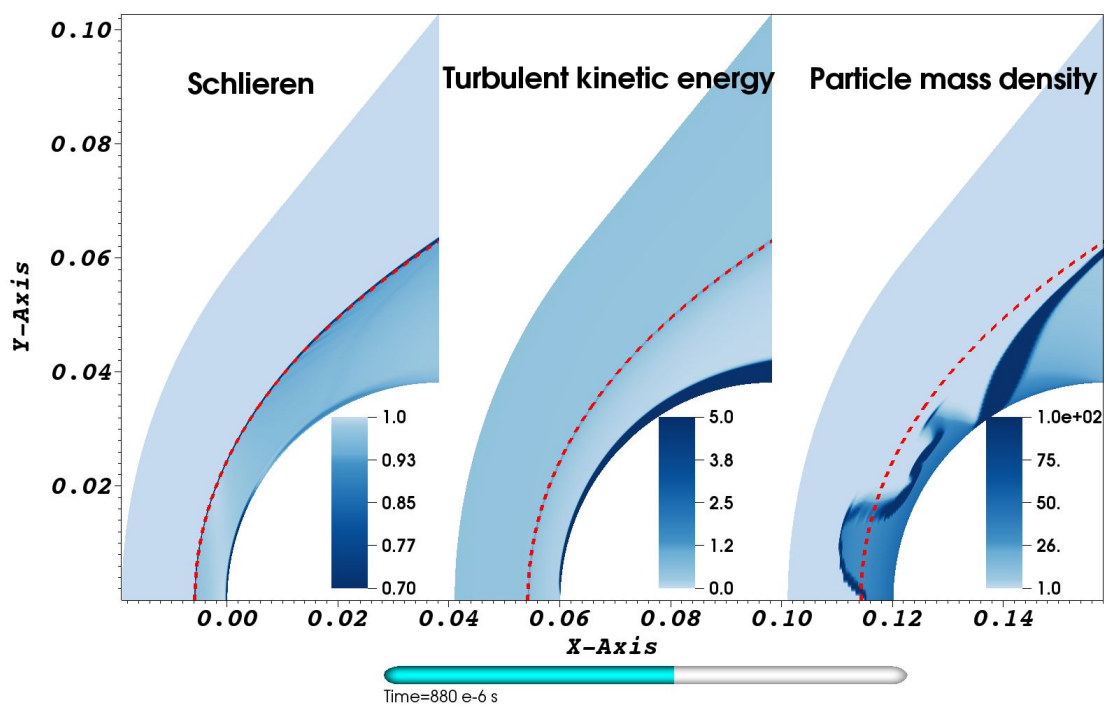


(A) Sans influence des particules sur la turbulence

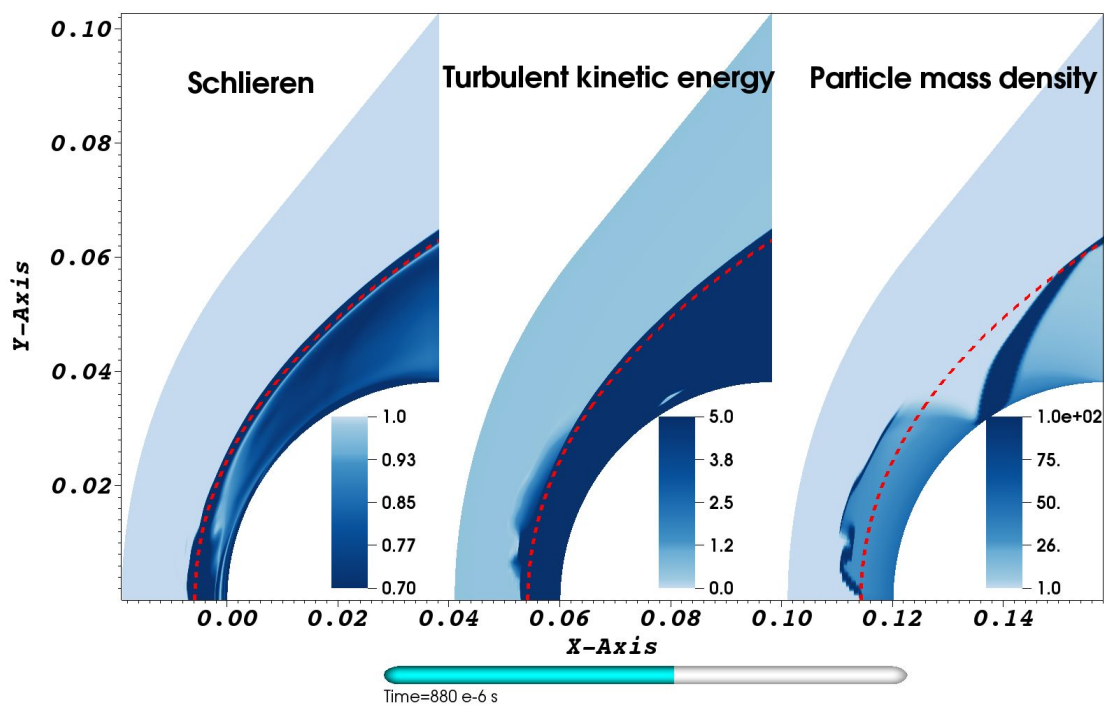


(B) Avec influence des particules sur la turbulence

FIGURE 5.30 – Pour chaque image : gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 0 \mu s$

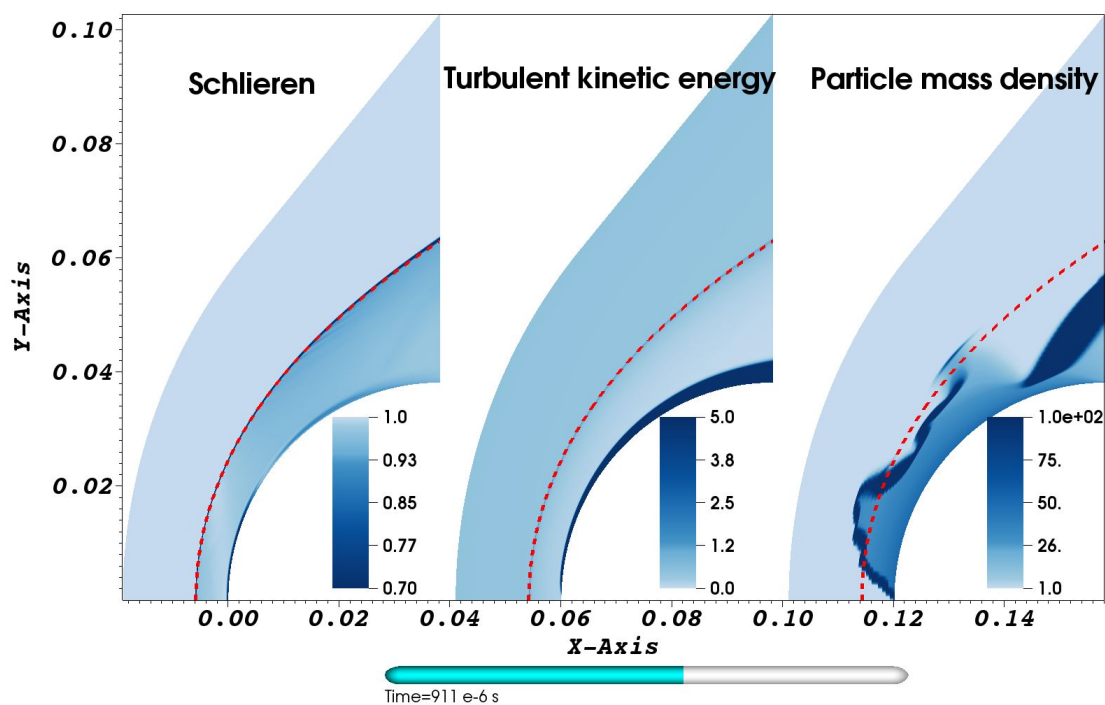


(A) Sans influence des particules sur la turbulence

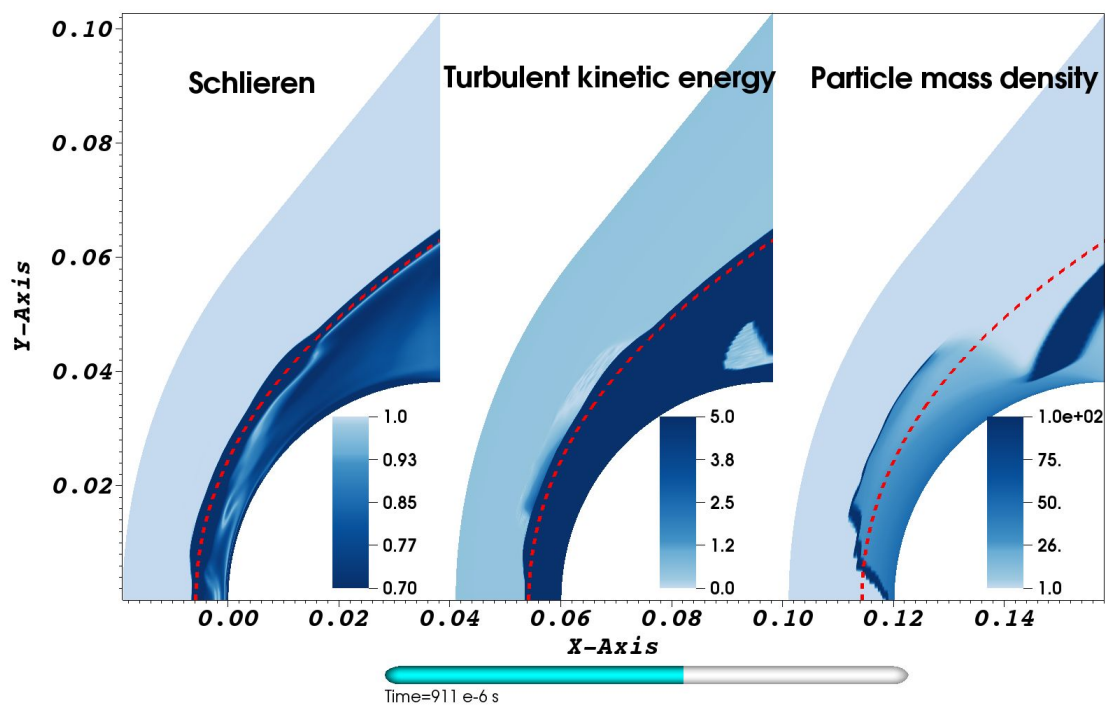


(B) Avec influence des particules sur la turbulence

FIGURE 5.31 – Pour chaque image : gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 880 \mu s$

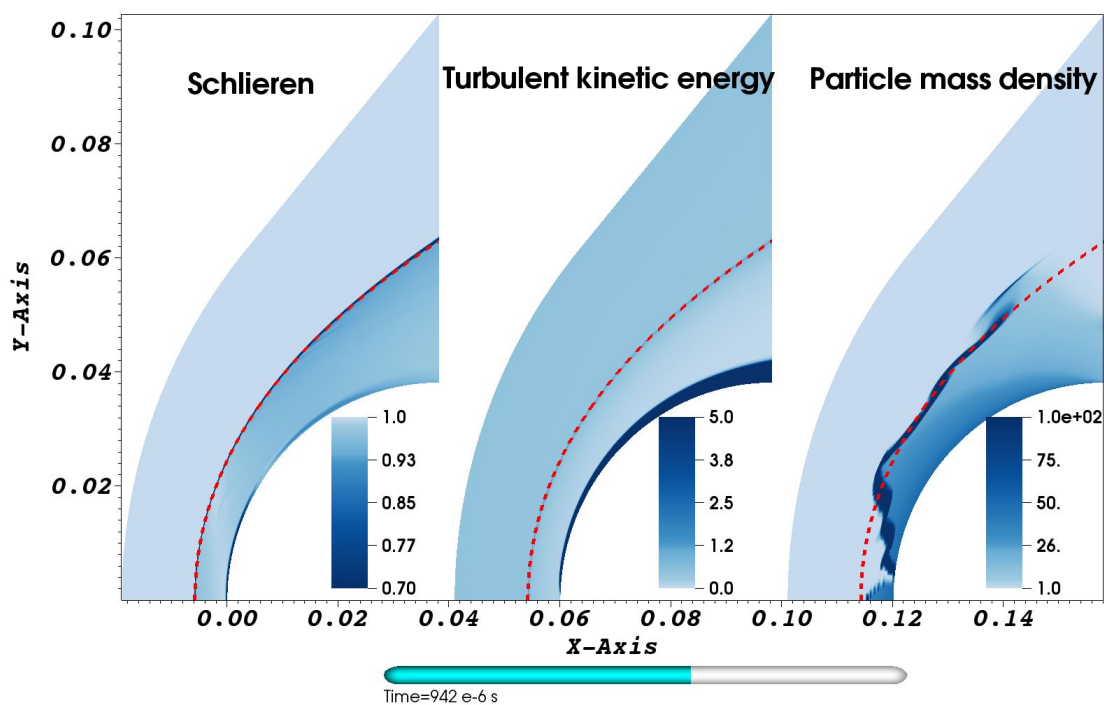


(A) Sans influence des particules sur la turbulence

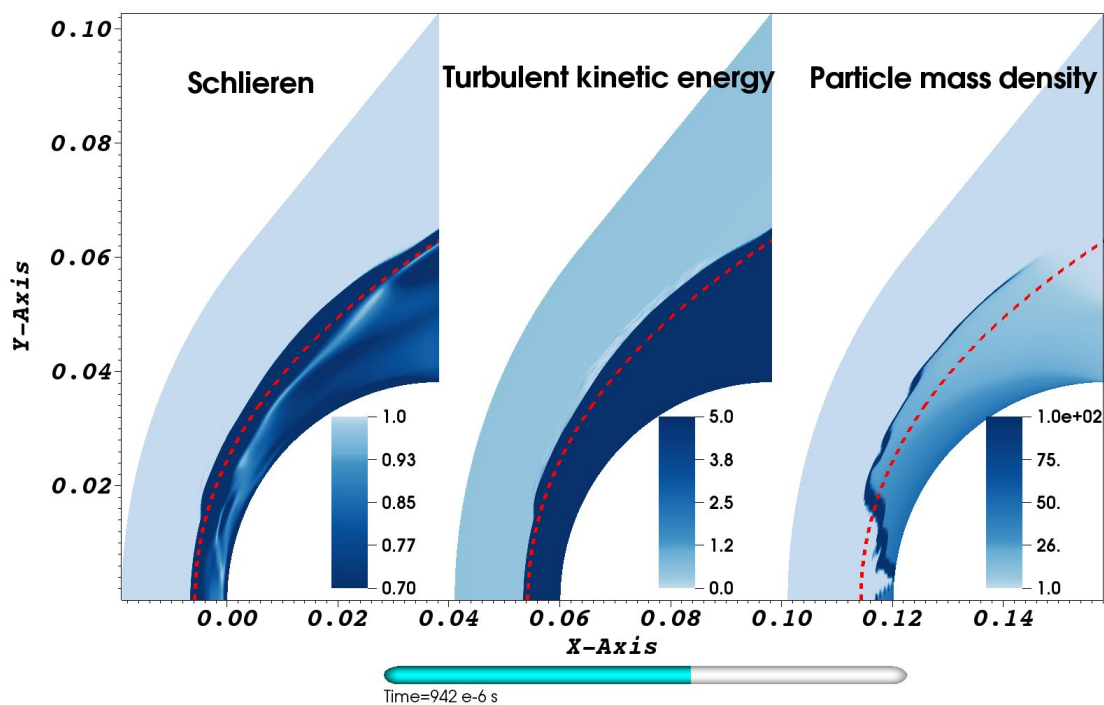


(B) Avec influence des particules sur la turbulence

FIGURE 5.32 – Pour chaque image : gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 911 \mu s$

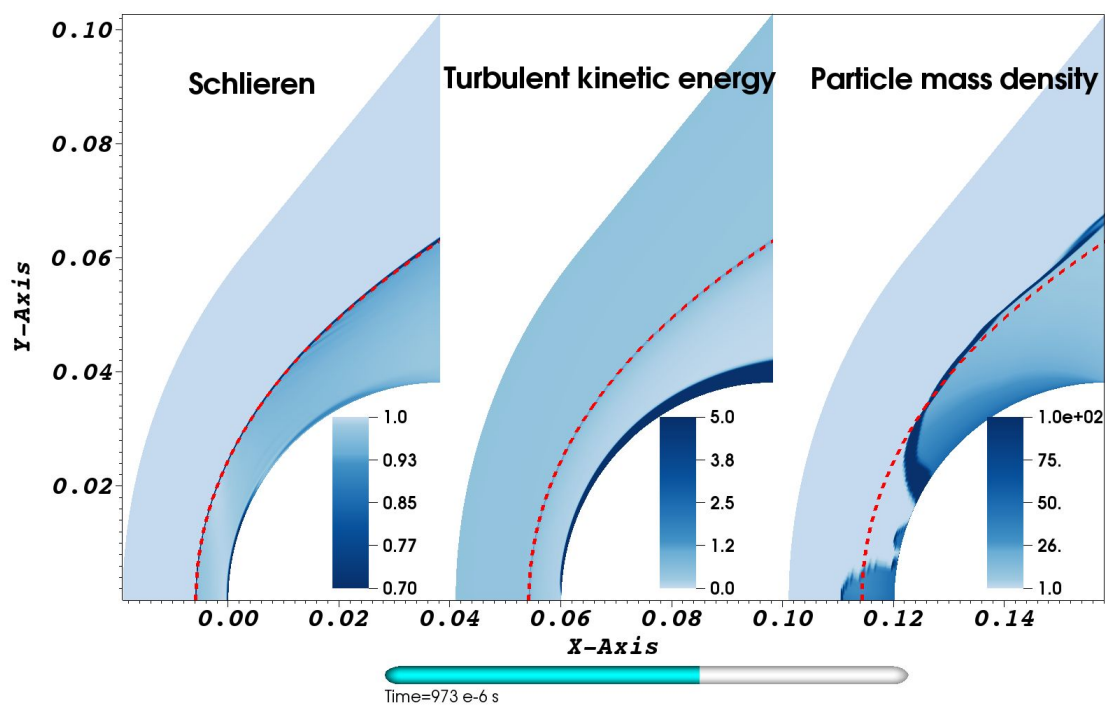


(A) Sans influence des particules sur la turbulence

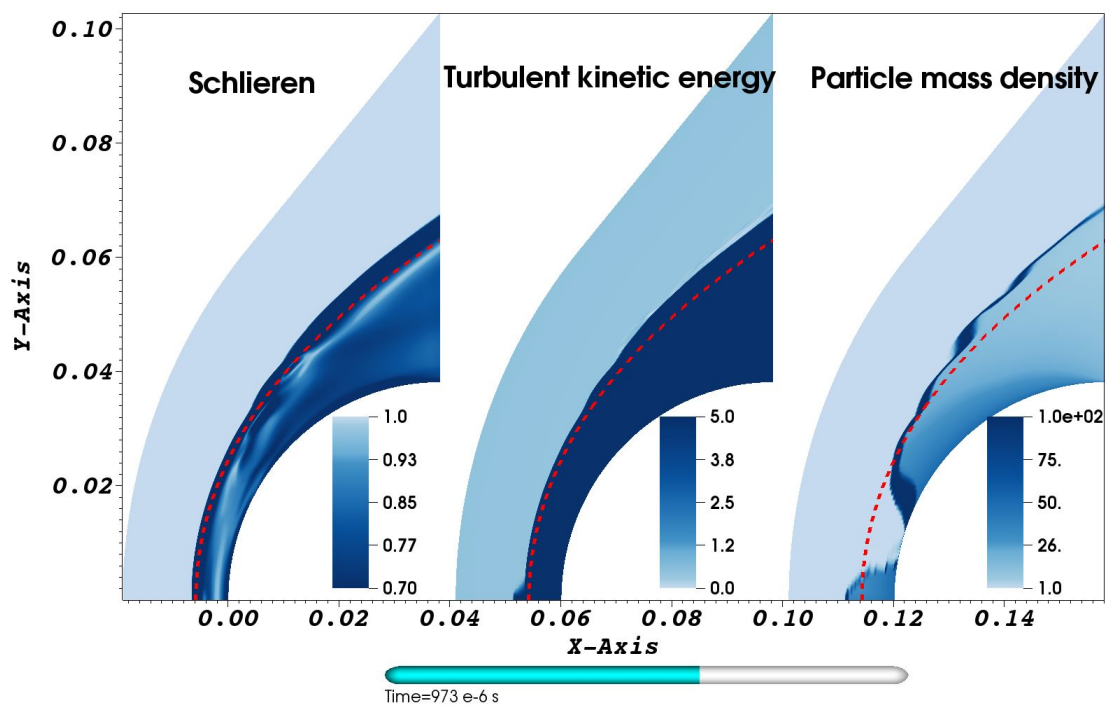


(B) Avec influence des particules sur la turbulence

FIGURE 5.33 – Pour chaque image : gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 942 \mu s$

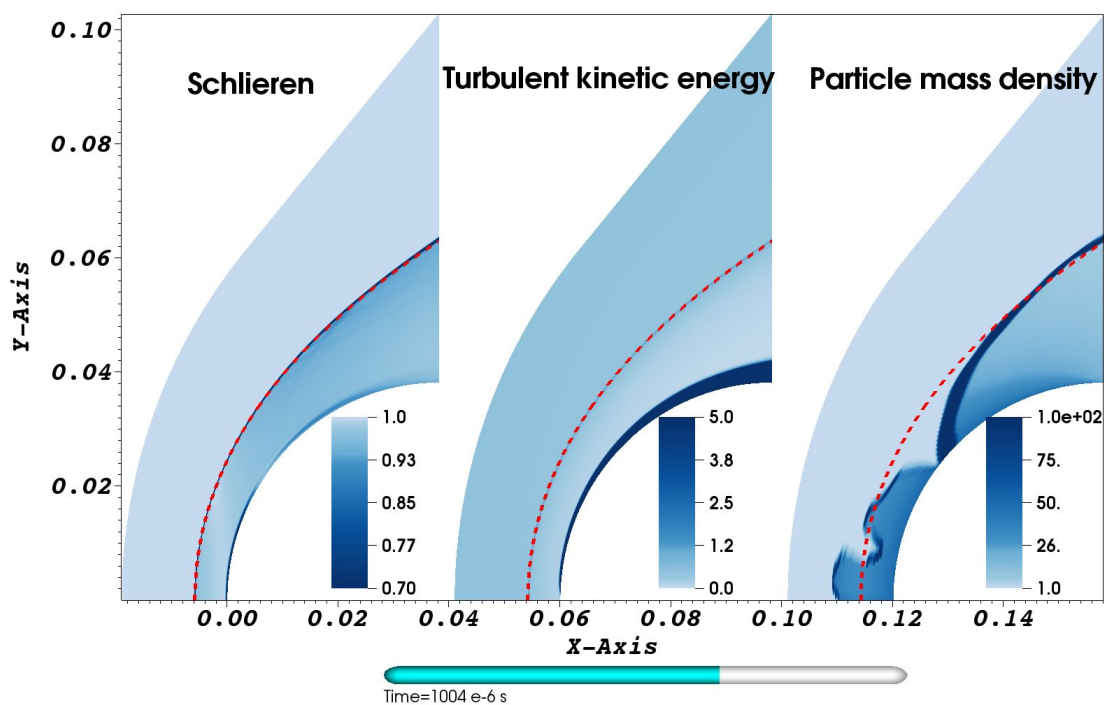


(A) Sans influence des particules sur la turbulence

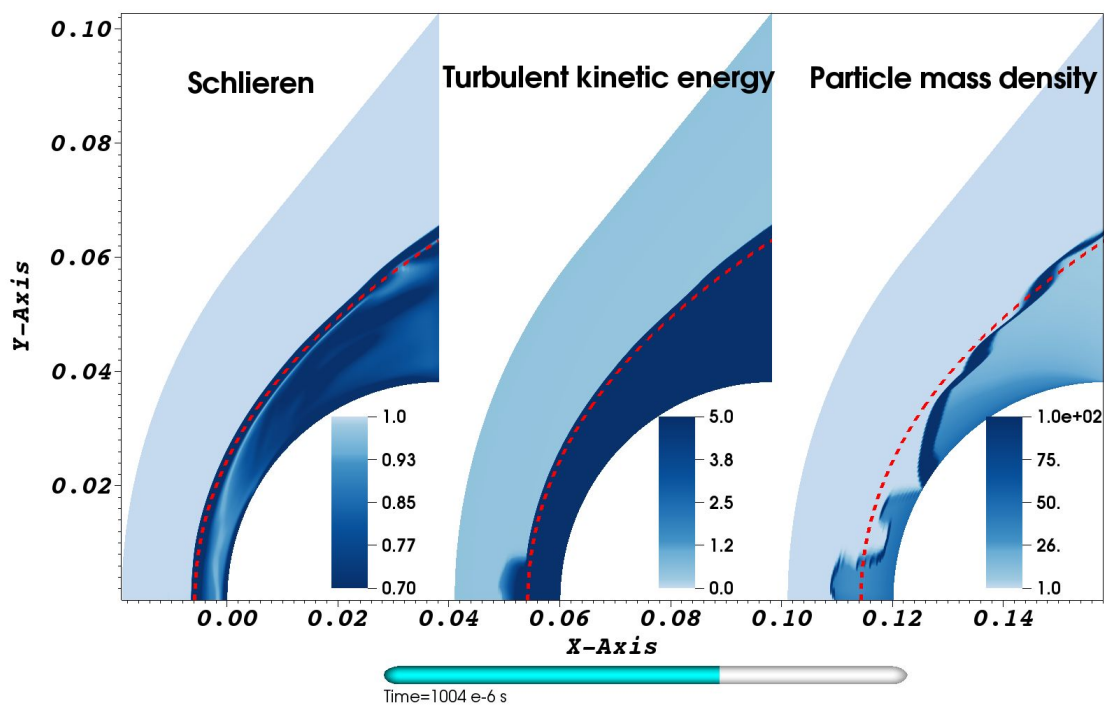


(B) Avec influence des particules sur la turbulence

FIGURE 5.34 – Pour chaque image : gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 973 \mu s$

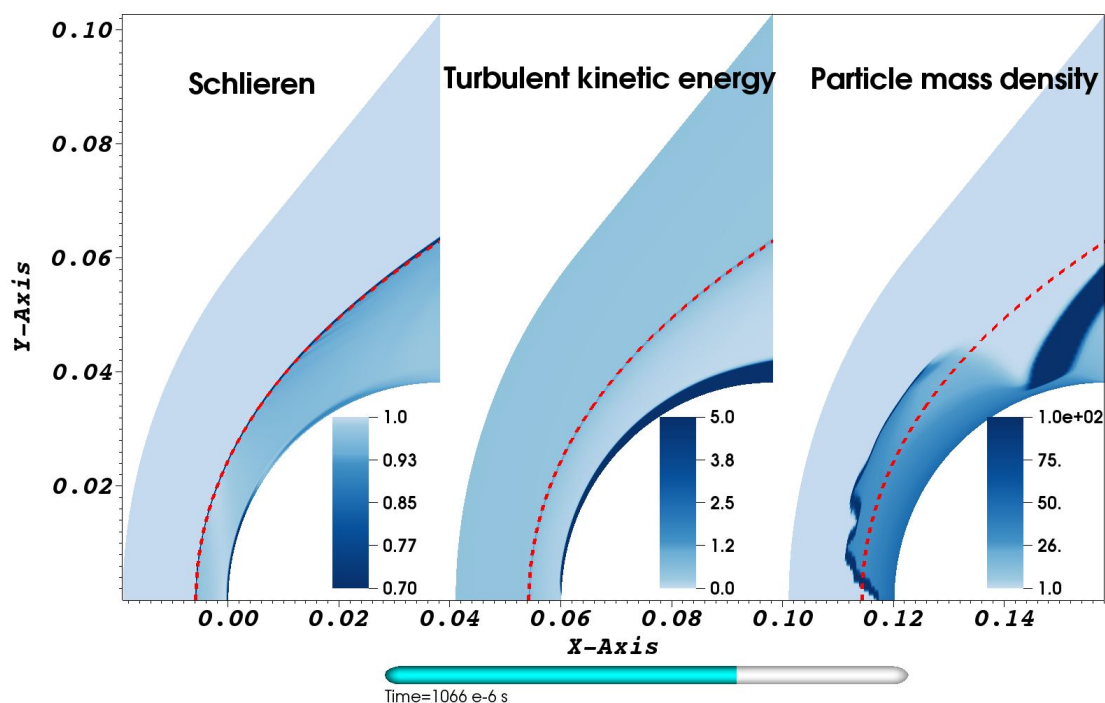


(A) Sans influence des particules sur la turbulence

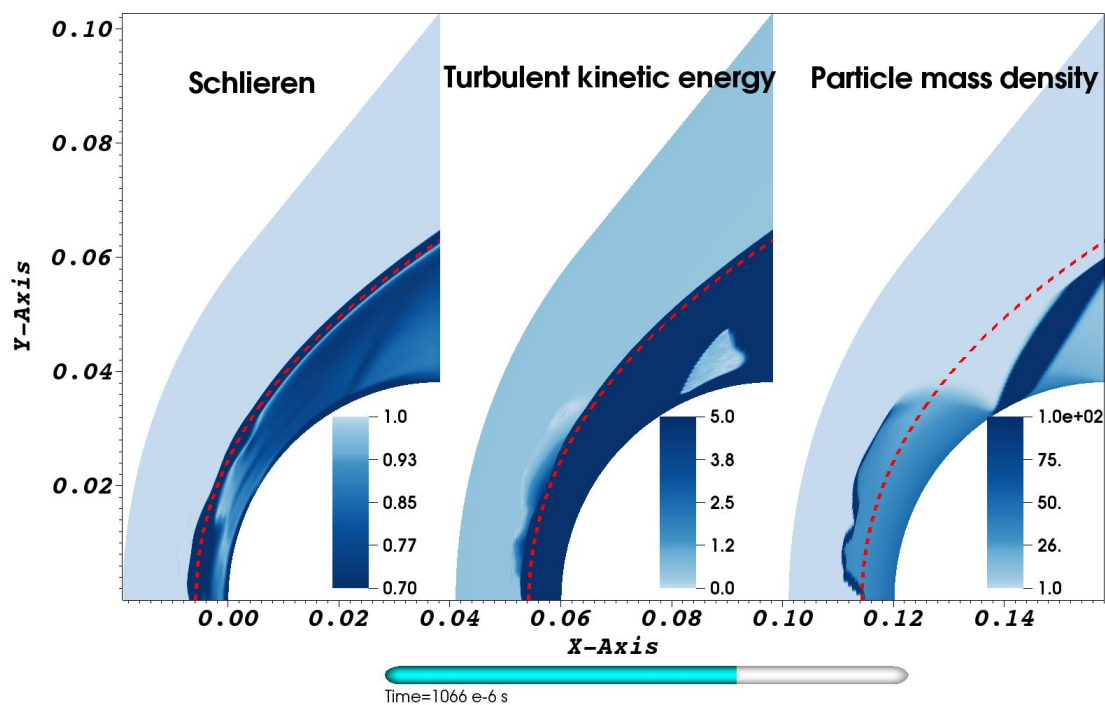


(B) Avec influence des particules sur la turbulence

FIGURE 5.35 – Pour chaque image : gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 1004 \mu s$

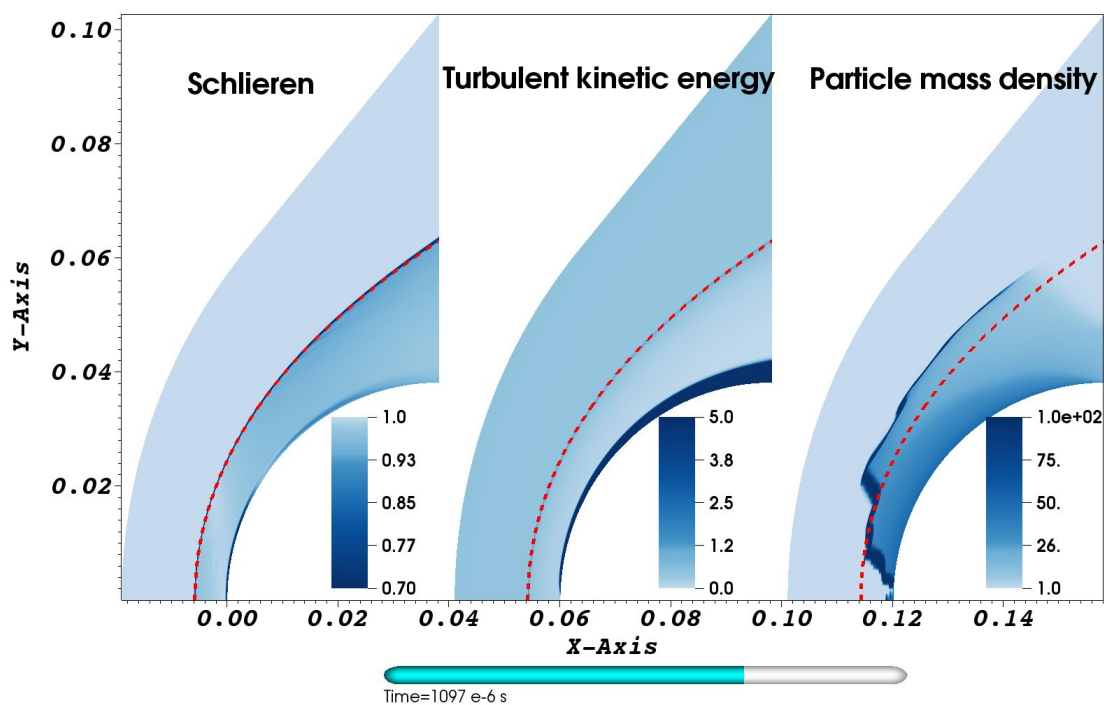


(A) Sans influence des particules sur la turbulence

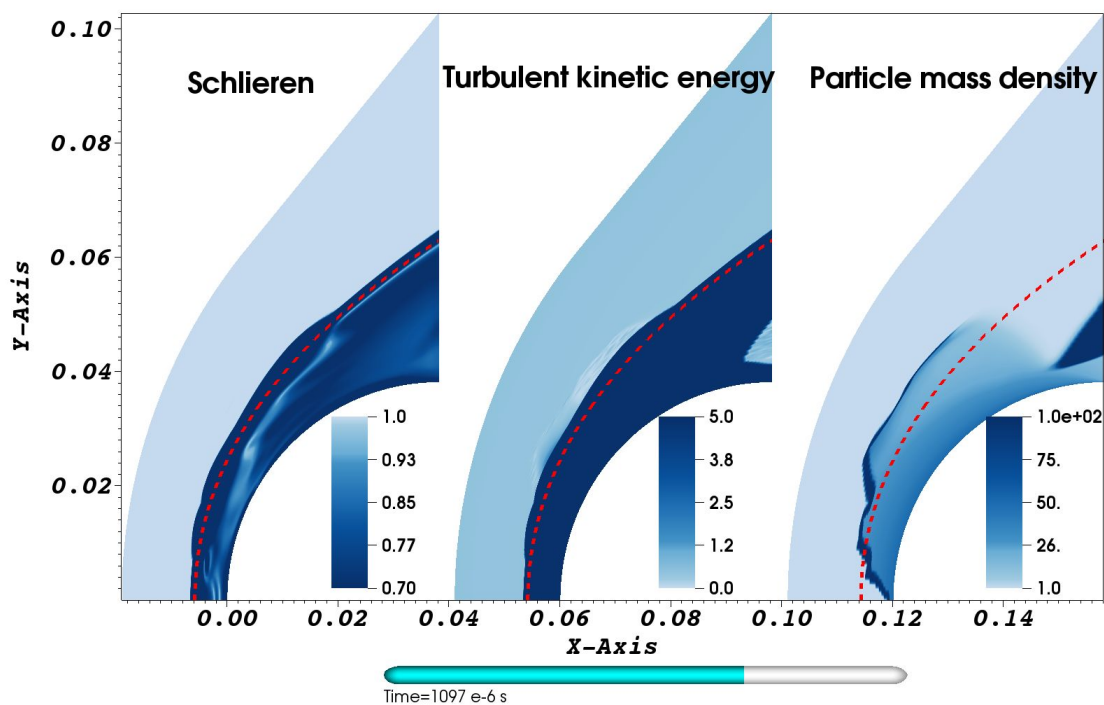


(B) Avec influence des particules sur la turbulence

FIGURE 5.36 – Pour chaque image : gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 1066 \mu s$

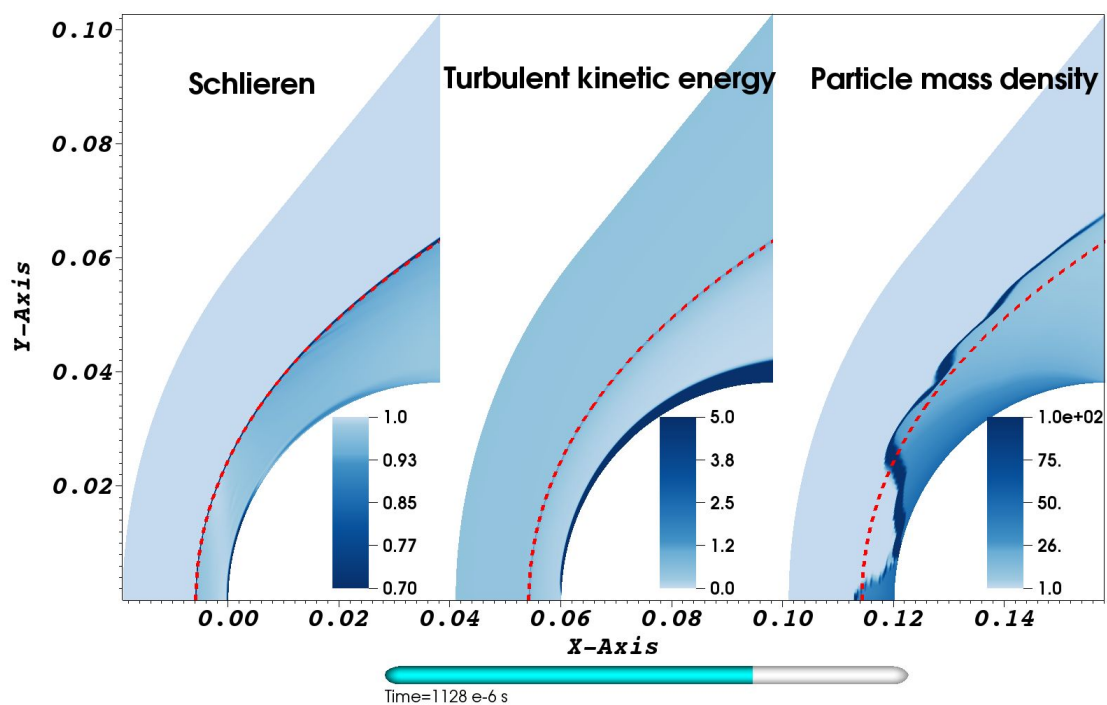


(A) Sans influence des particules sur la turbulence

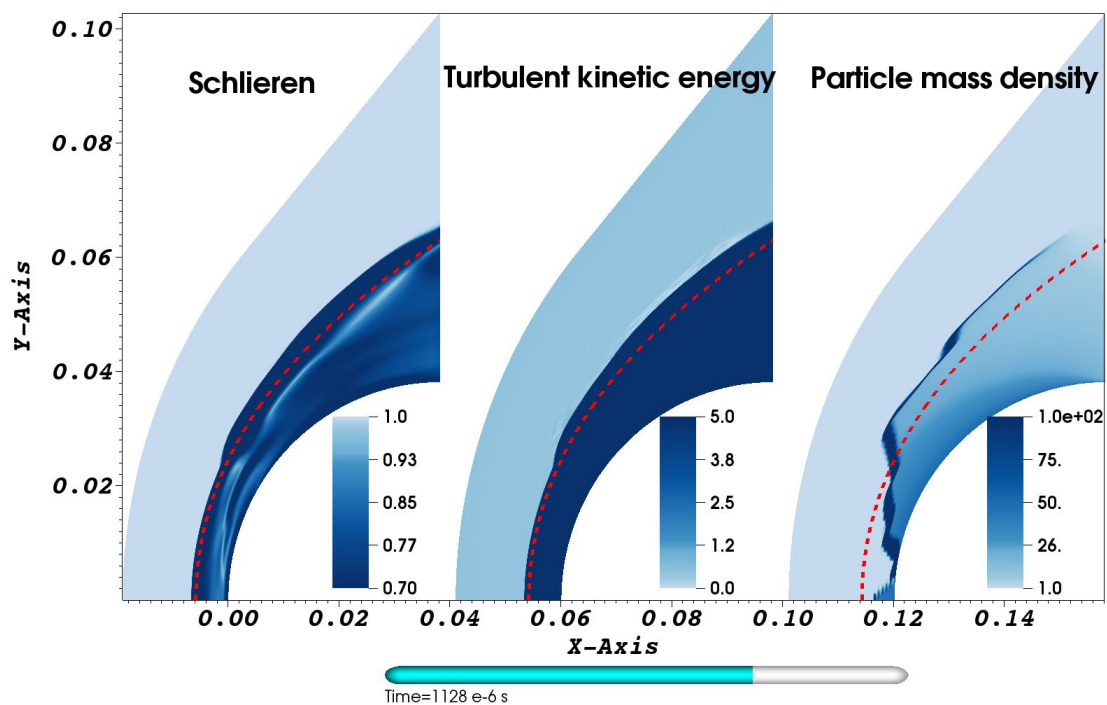


(B) Avec influence des particules sur la turbulence

FIGURE 5.37 – Pour chaque image : gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 1097 \mu s$



(A) Sans influence des particules sur la turbulence



(B) Avec influence des particules sur la turbulence

FIGURE 5.38 – Pour chaque image : gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 1128 \mu s$

5.2.4 Étude de sensibilité

Comme nous venons de le voir, le phénomène de déstabilisation de choc, observé expérimentalement, peut être reproduit *via* la prise en compte d'un terme source de production de turbulence par les particules. L'expression du terme source est donc très importante. L'hypothèse de Hulin et Znaty nous paraît majorante, en ce sens qu'elle surestime l'influence des particules sur la turbulence. Dans la littérature, il existe plusieurs modèles pour prendre en compte de manière plus précise l'influence des particules sur la production de turbulence d'un fluide [20, 29, 39, 74]. Ces modèles sont complexes, nécessitent la résolution de transport d'équations supplémentaires, et reposent tous sur des hypothèses simplificatrices. De plus aucun n'a été validé (ni même développé) pour traiter des applications dans la gamme des écoulements supersoniques. C'est la raison pour laquelle, nous avons préféré nous limiter ici à une approche beaucoup plus simple consistant à supposer que le terme lié à la production de turbulence est simplement proportionnel à la puissance volumique de la force de traînée (dans le repère local se déplaçant à la vitesse moyenne du fluide). Introduisons α_{turb} ce facteur de proportionnalité :

$$\mathbf{S}_{\rho\mathbf{k}} = \alpha_{turb} \sum_{l=1}^N n_l \mathbf{F}_l (\tilde{\mathbf{u}}_{\mathbf{f}} - \mathbf{v}_l) \quad (5.11)$$

Le modèle (5.11) peut donc être considéré comme une variante paramétrée du modèle de Hulin et Znaty. L'objectif est de déterminer une plage de validité pour α_{turb} à partir des travaux théoriques existants. Pour cela, il serait intéressant d'étudier de manière plus précise l'influence des particules sur la turbulence et de déterminer une plage de validité pour α_{turb} . Nous n'avons malheureusement pas eu le temps d'effectuer cette caractérisation. Néanmoins, nous avons effectué une étude de sensibilité sur les paramètres α_{turb} et ϵ_{tot} afin de déterminer leurs influences respectives. Le paramètre ϵ_{tot} est *a priori* compris entre 0 et 0.1 (grâce au calcul effectué avec le code d'hydrodynamique). Le paramètre α_{turb} est lui compris entre 0 et 1. Nous avons alors effectué 306 simulations correspondant aux couples $(\epsilon_{tot}, \alpha_{turb})$, variant dans l'espace $[0,0.1] \times [0,1]$, discrétisé par pas de 0.02. Pour chaque simulation, nous analysons si le choc se déforme. Si une déformation est observée, nous représentons le point correspondant au couple $(\epsilon_{tot}, \alpha_{turb})$ en vert. Dans le cas contraire, nous le représentons en rouge. La figure 5.39 représente les résultats issus de cette étude de sensibilité.

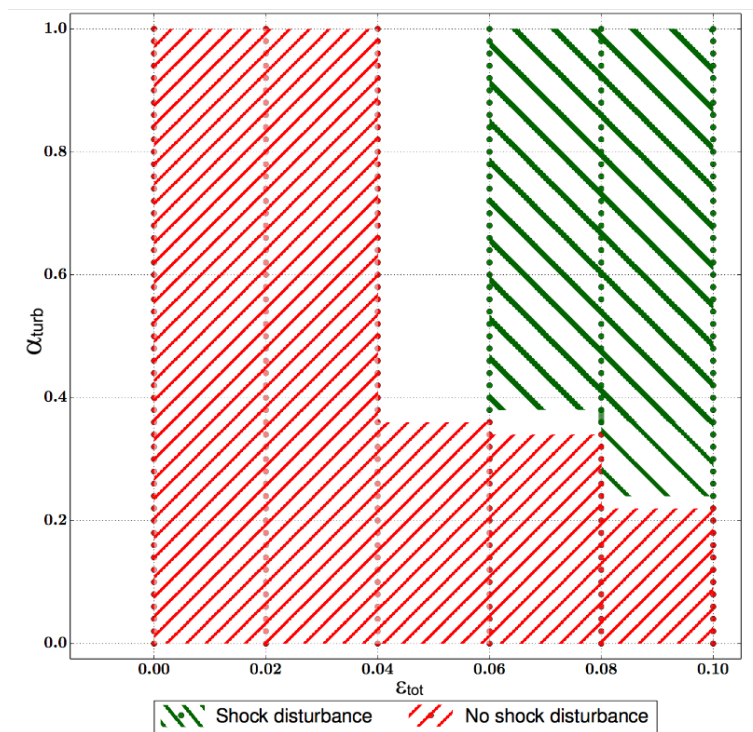


FIGURE 5.39 – Étude de sensibilité des paramètres $(\epsilon_{tot}, \alpha_{turb})$

La première constatation est la présence d'une valeur limite d' ϵ_{tot} sous laquelle nous n'observons pas de déformation. En effet, si le paramètre est inférieur à 0.06, aucune déformation n'est observée. Pour comprendre l'origine de ce seuil, nous traçons (cf. Fig. 5.40 à 5.44) la vitesse des particules après rebond lorsque le paramètre ϵ_{tot} vaut respectivement 0.04 et 0.06.

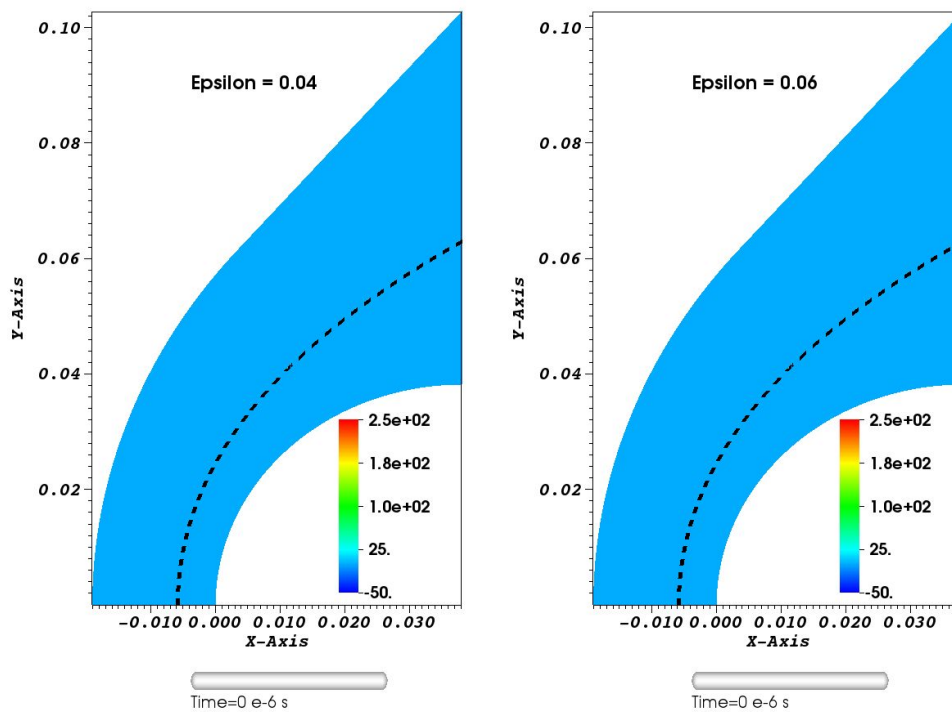


FIGURE 5.40 – Évolution de la vitesse des particules après rebond : $\epsilon_{tot} = 0.04$ (à gauche), $\epsilon_{tot} = 0.06$ (à droite)

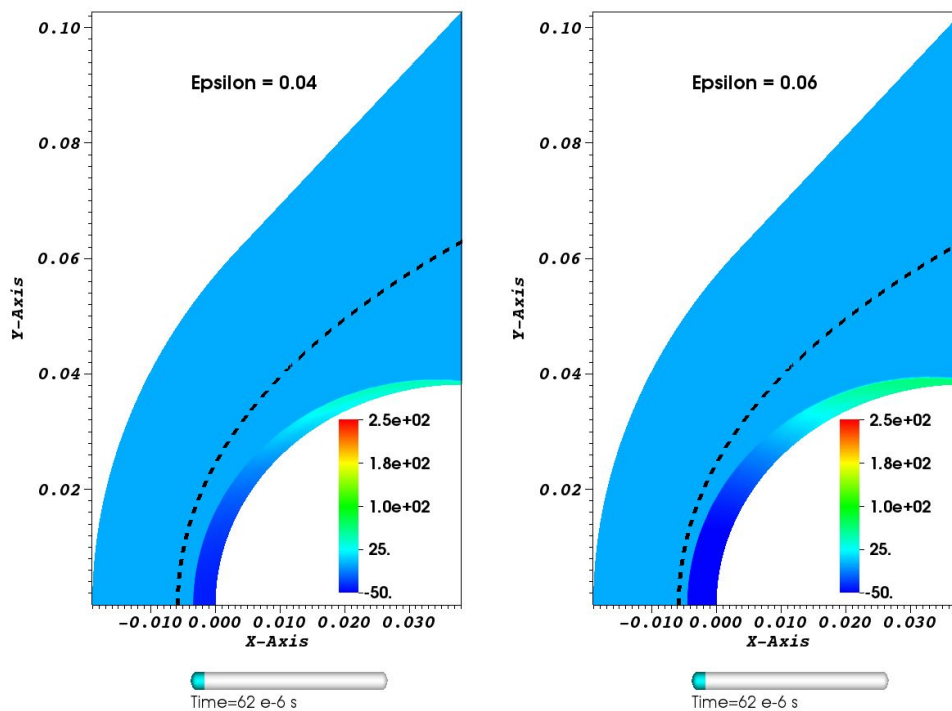


FIGURE 5.41 – Évolution de la vitesse des particules après rebond : $\epsilon_{tot} = 0.04$ (à gauche), $\epsilon_{tot} = 0.06$ (à droite)

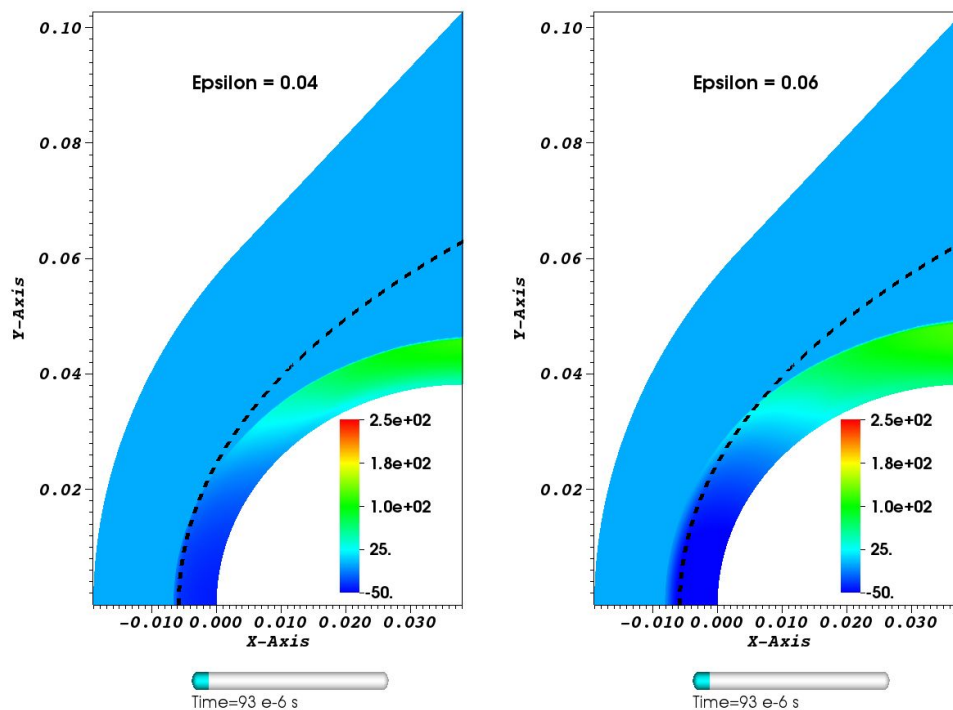


FIGURE 5.42 – Évolution de la vitesse des particules après rebond : $\epsilon_{tot} = 0.04$ (à gauche), $\epsilon_{tot} = 0.06$ (à droite)

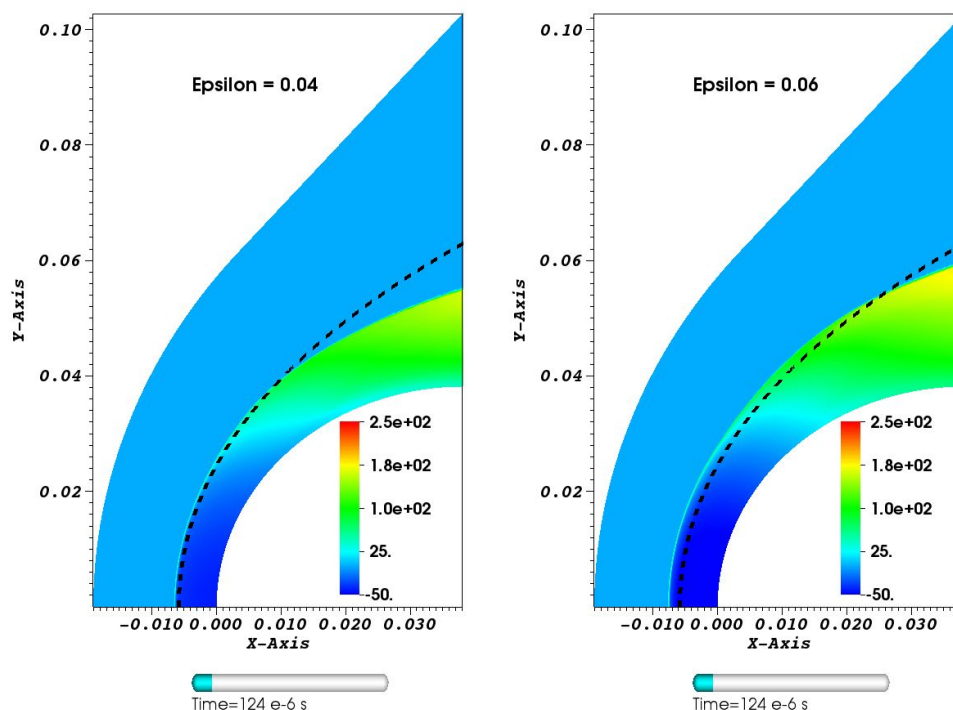


FIGURE 5.43 – Évolution de la vitesse des particules après rebond : $\epsilon_{tot} = 0.04$ (à gauche), $\epsilon_{tot} = 0.06$ (à droite)

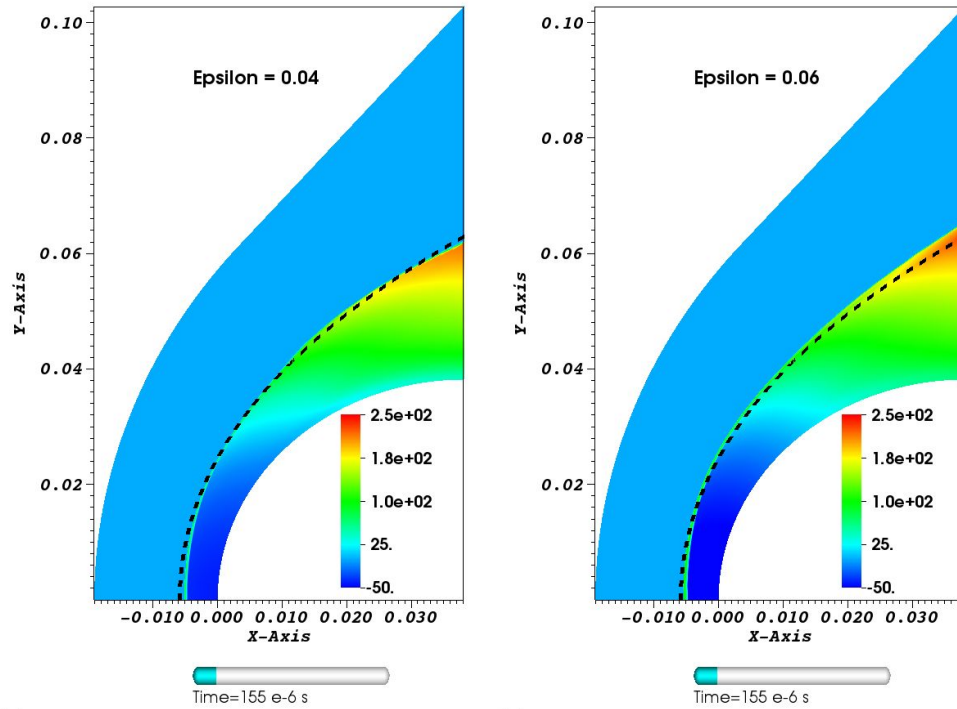


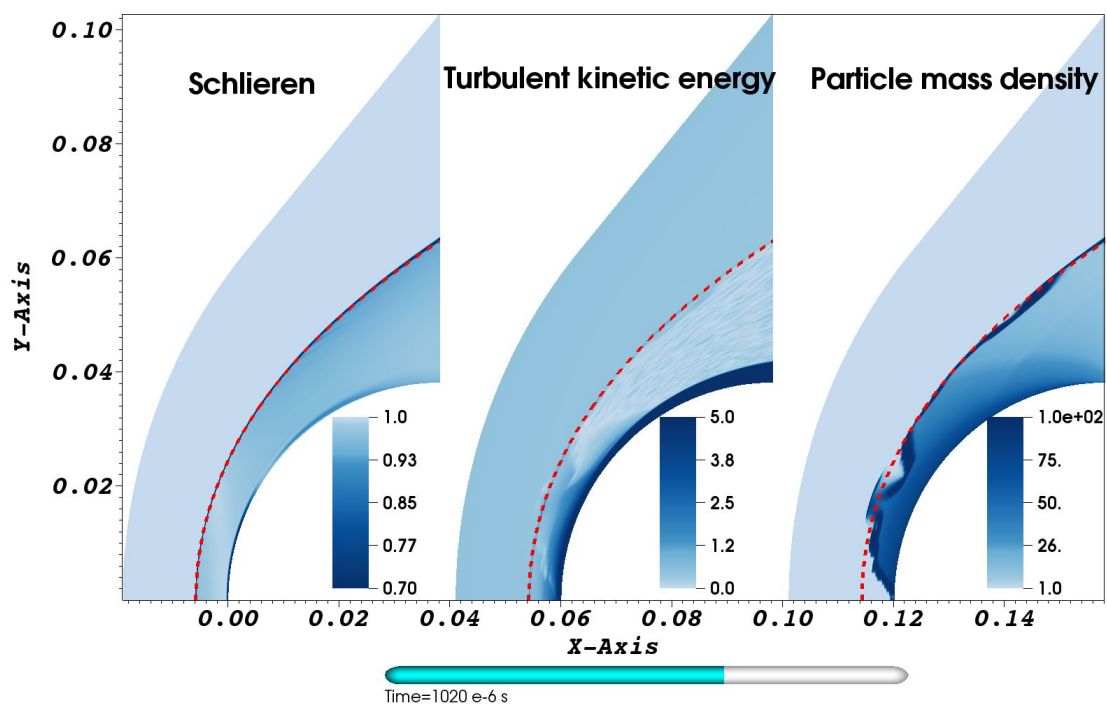
FIGURE 5.44 – Évolution de la vitesse des particules après rebond : $\epsilon_{tot} = 0.04$ (à gauche), $\epsilon_{tot} = 0.06$ (à droite)

Ces graphiques permettent de comprendre l'origine de cette valeur seuil : lorsque ϵ_{tot} est trop faible, les particules repartent de la paroi avec une vitesse faible qui ne leur permet pas de traverser le choc. Elles se retrouvent donc bloquées au niveau du choc avec une vitesse nulle et repartent ensuite dans l'écoulement. À l'inverse, lorsque ϵ_{tot} est suffisamment grand, les particules peuvent traverser le choc. La différence de vitesse entre les particules et le fluide étant alors très importante, la force de traînée et donc le terme source de production de turbulence (dans le cadre des hypothèses de modélisation adoptées) le sont également, ce qui entraîne la déformation du choc.

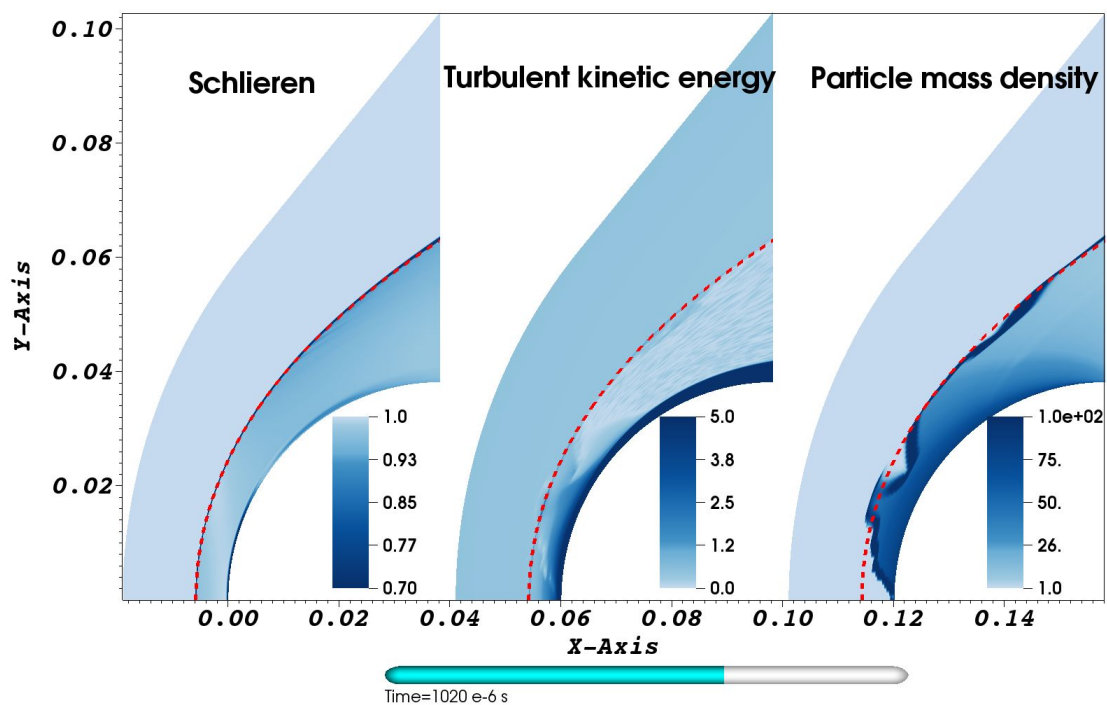
Sur la figure 5.39, il apparaît une seconde valeur seuil, cette fois pour le coefficient α_{turb} . Celle-ci dépend de la valeur de ϵ_{tot} :

- entre 0.36 et 0.38 pour $\epsilon_{tot} = 0.06$,
- entre 0.34 et 0.36 pour $\epsilon_{tot} = 0.08$,
- entre 0.22 et 0.24 pour $\epsilon_{tot} = 0.1$.

Pour mieux comprendre l'origine de ce seuil, nous traçons (cf. Fig. 5.45 à 5.49) les champs de gradient de densité du fluide, l'énergie cinétique turbulente et la masse adimensionnée des particules pour $\alpha_{turb} = 0.36$ et $\alpha_{turb} = 0.38$. Le coefficient ϵ_{tot} a été fixé à 0.06.

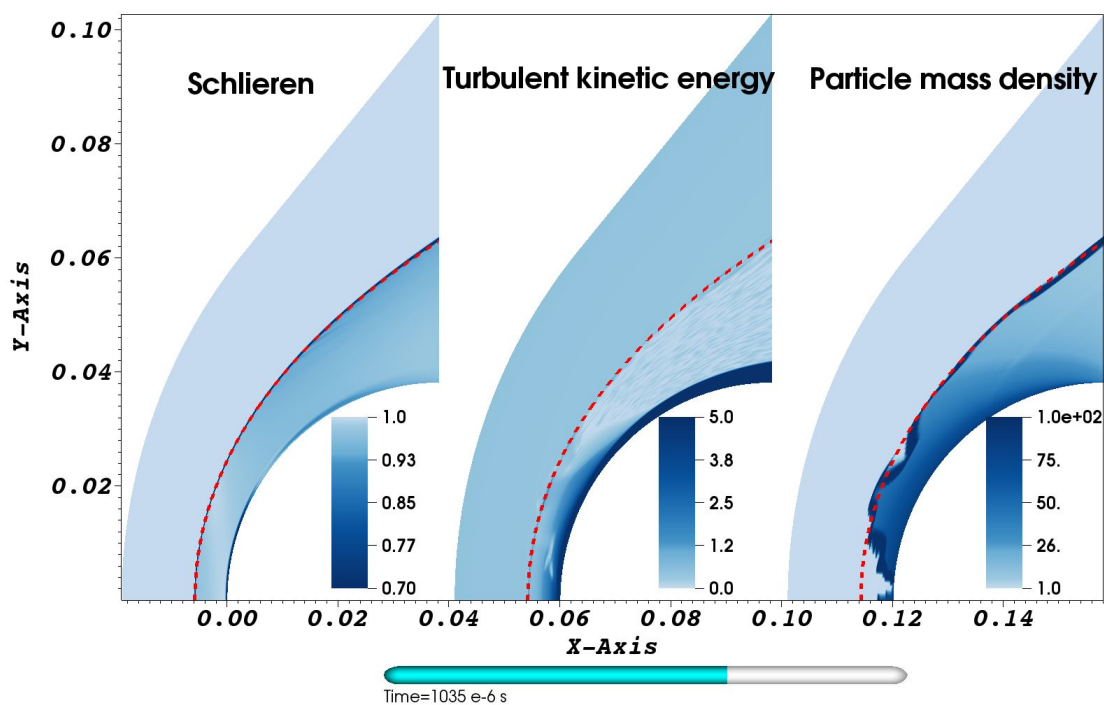


(A) $\alpha_{turb} = 0.36$

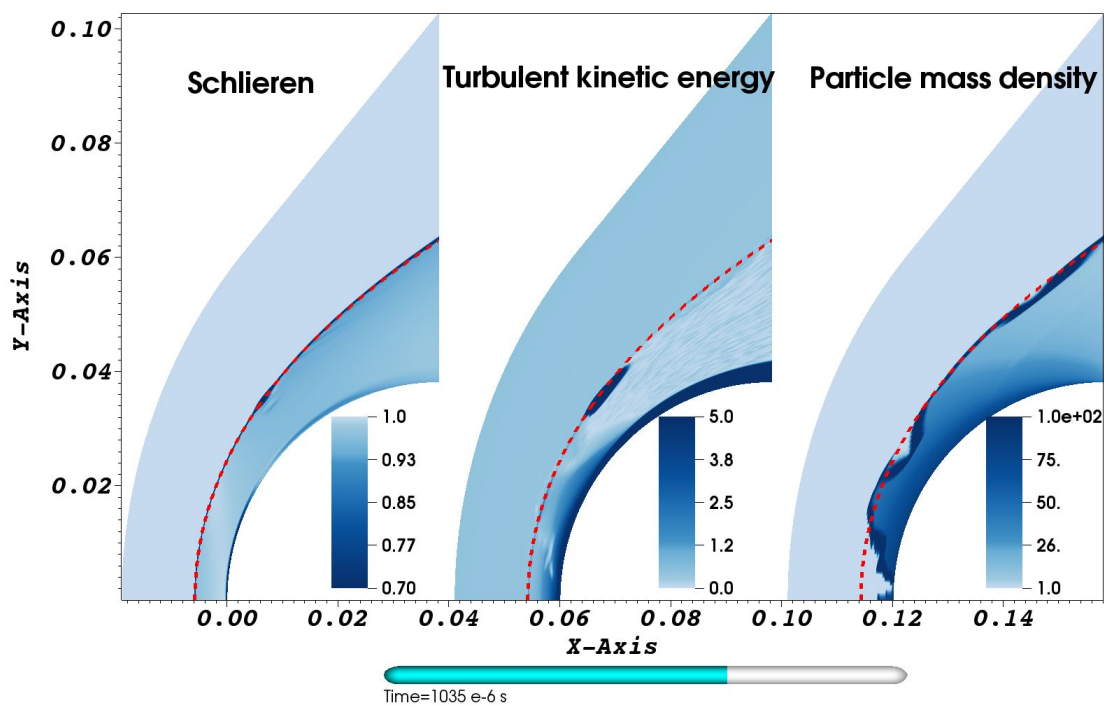


(B) $\alpha_{turb} = 0.38$

FIGURE 5.45 – Pour chaque image : gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 1020 \mu s$

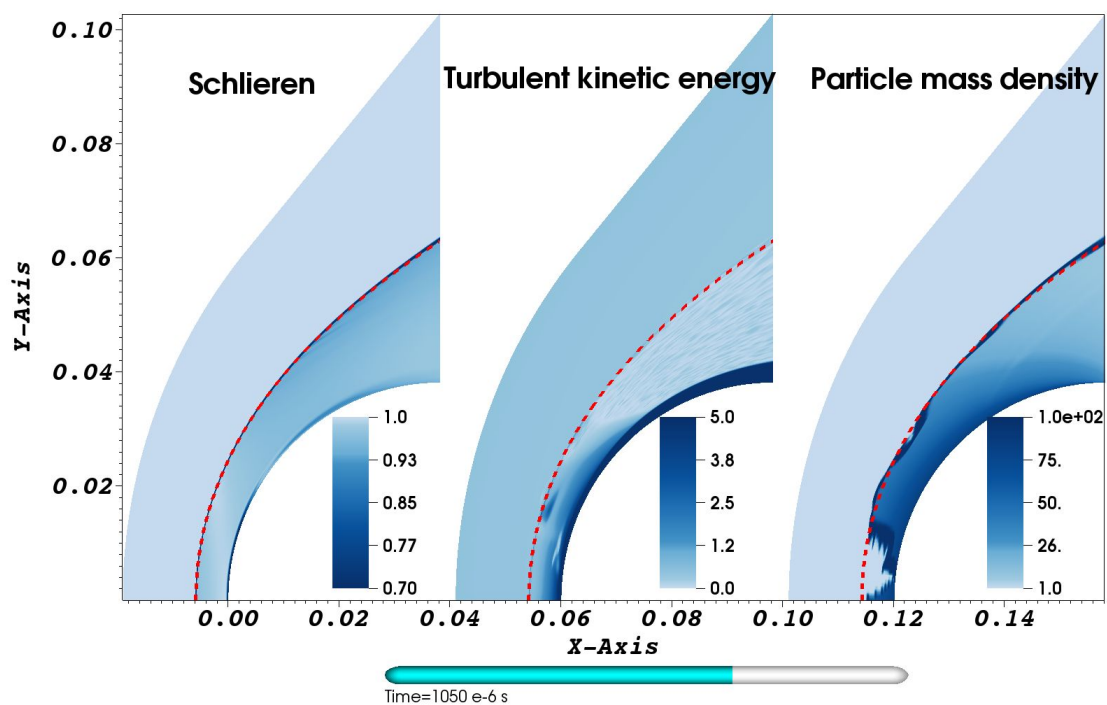


(A) $\alpha_{turb} = 0.36$

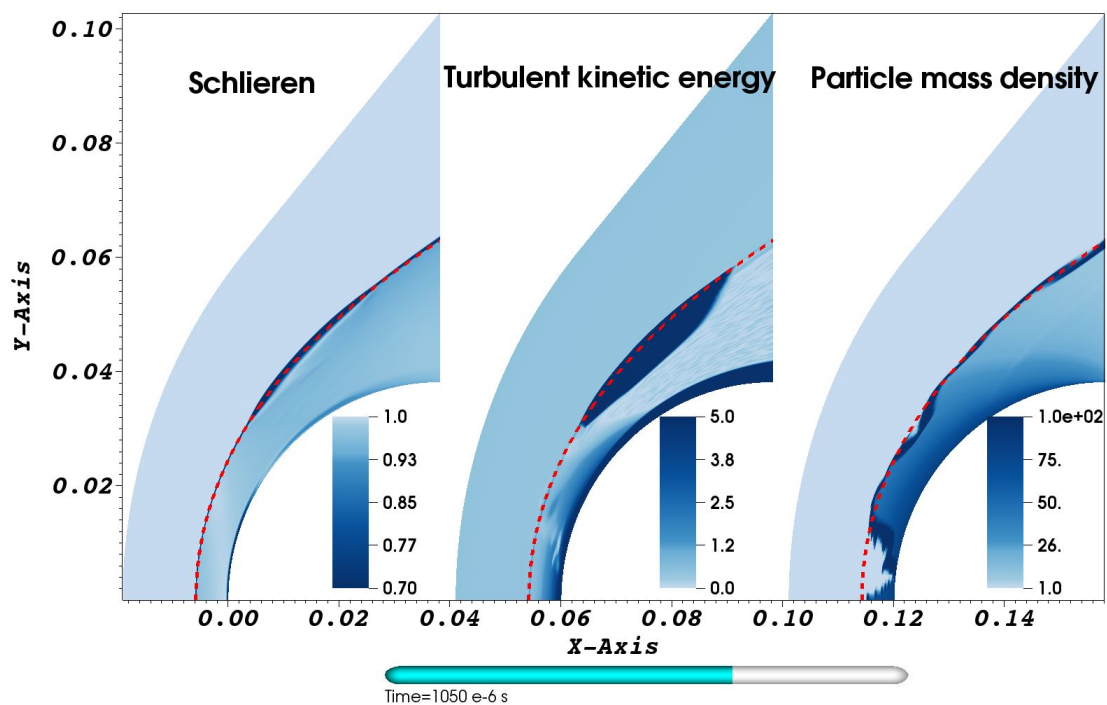


(B) $\alpha_{turb} = 0.38$

FIGURE 5.46 – Pour chaque image : gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 1035 \mu s$

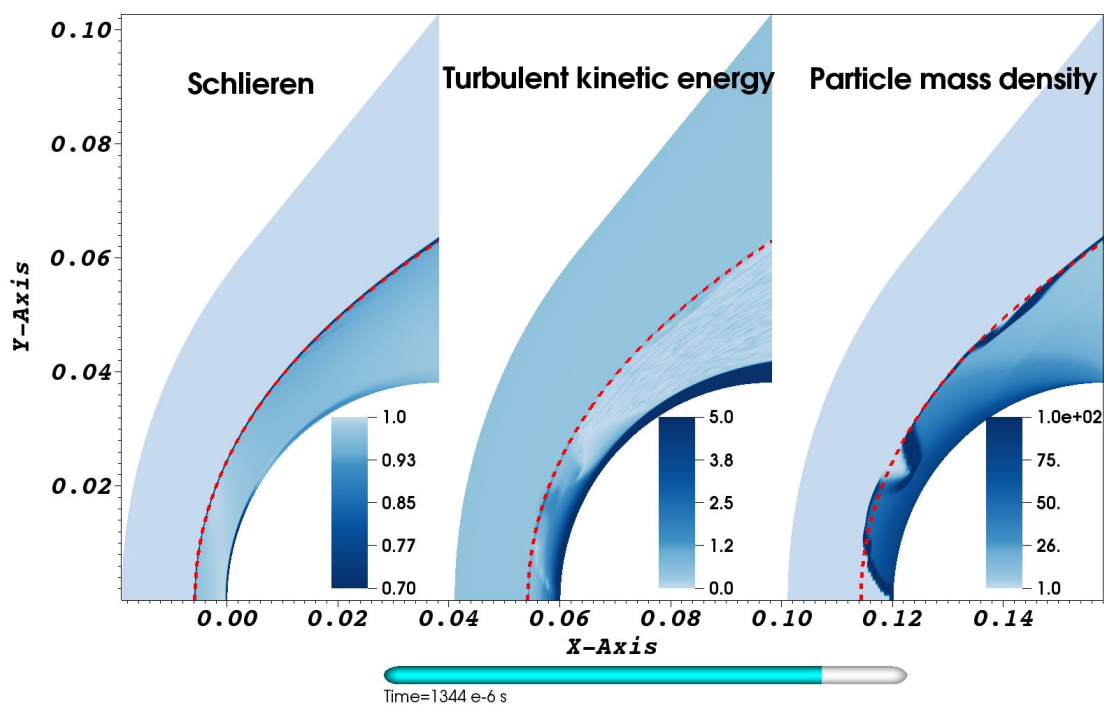


(A) $\alpha_{turb} = 0.36$

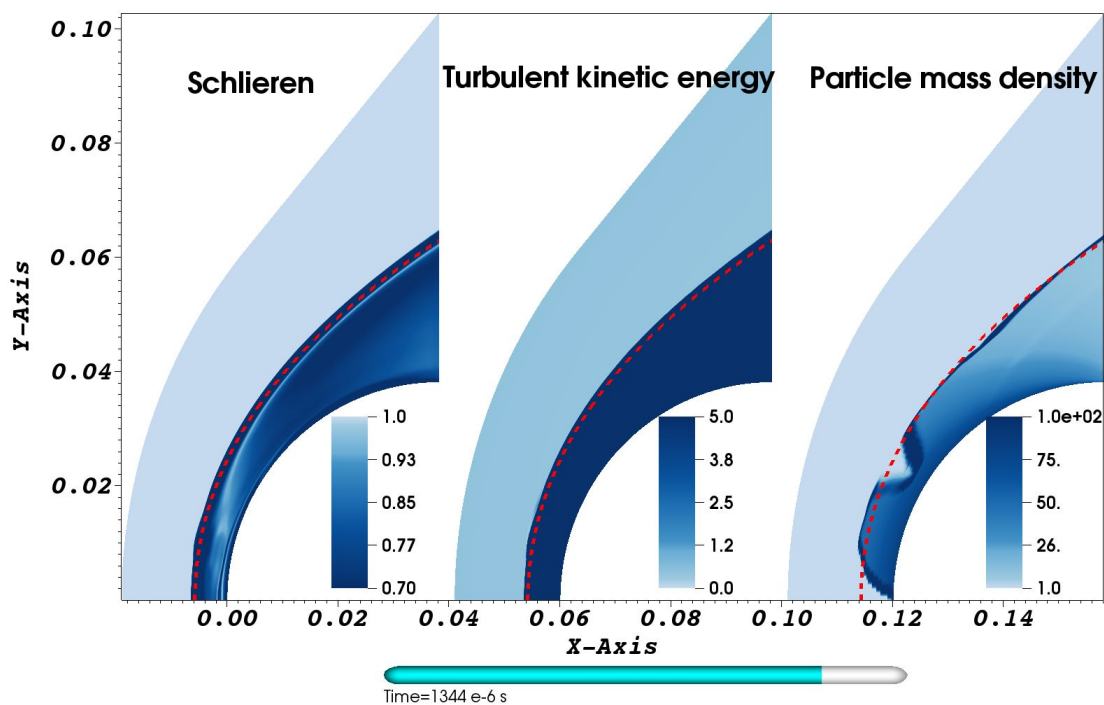


(B) $\alpha_{turb} = 0.38$

FIGURE 5.47 – Pour chaque image : gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 1050 \mu s$

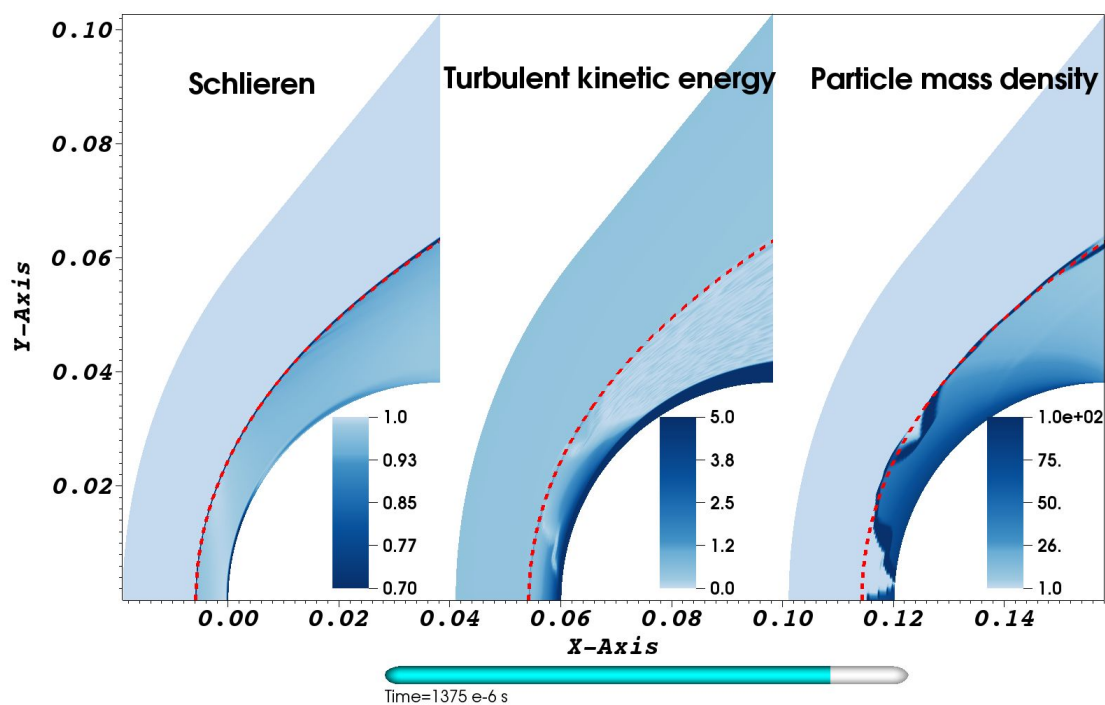


(A) $\alpha_{turb} = 0.36$

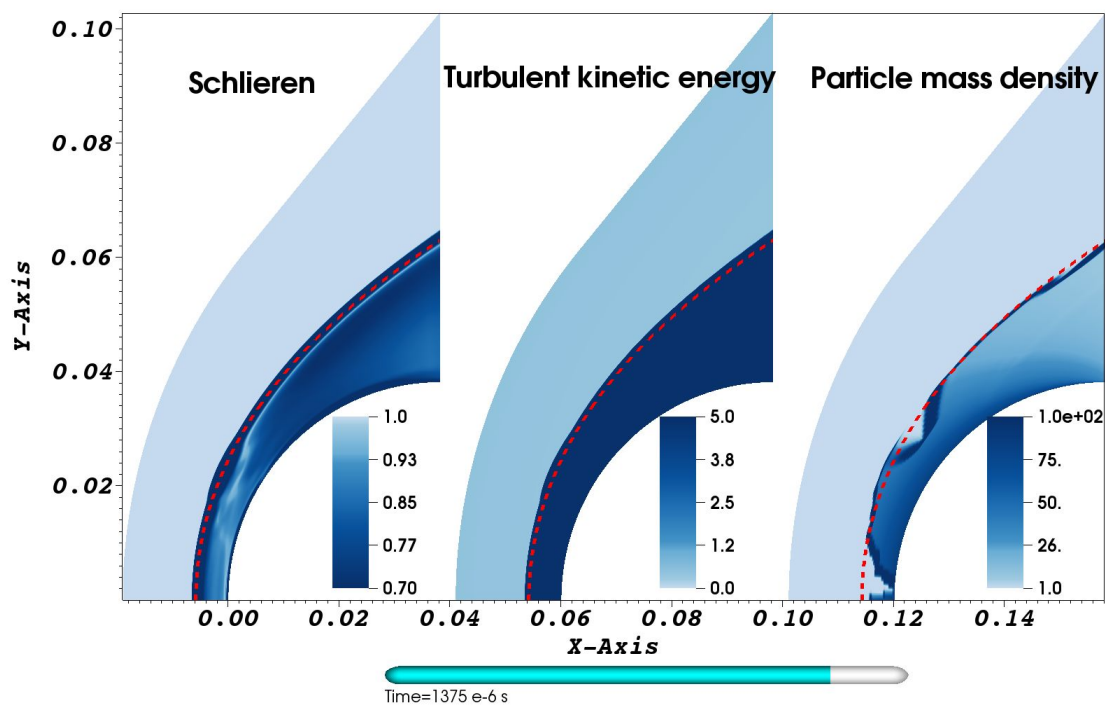


(B) $\alpha_{turb} = 0.38$

FIGURE 5.48 – Pour chaque image : gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 1344 \mu s$



(A) $\alpha_{turb} = 0.36$



(B) $\alpha_{turb} = 0.38$

FIGURE 5.49 – Pour chaque image : gradient de densité du fluide (à gauche), énergie cinétique turbulente du fluide (au milieu) et concentration massique adimensionnée des particules (à droite), $t = 1344 \mu s$

Pour $\alpha_{turb} = 0.36$ la production de turbulence n'est pas suffisante pour déstabiliser le choc. L'écoulement amont tend à stabiliser le choc et il garde sa forme initiale. Pour $\alpha_{turb} = 0.38$, une faible déformation est observée. Même si, comme nous venons de le voir, il existe une valeur seuil, la transition s'effectue de manière continue. En effet, la déformation observée pour $\alpha_{turb} = 0.38$ est faible. Nous ne sommes pas en présence de deux comportements radicalement différents avec un passage discontinu de l'un à l'autre. Cela est rassurant puisque la valeur de α_{turb} n'a pas de justification théorique. Néanmoins, il est essentiel d'effectuer des études complémentaires afin de déterminer la plage de validité théorique du paramètre α_{turb} et de la comparer à la plage de déformation présentée à la figure 5.39.

5.3 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons utilisé le code SDFS pour reproduire et étudier deux phénomènes observés expérimentalement.

Le premier, issu des résultats de Chauvin, présente le comportement d'un brouillard dense de particules liquides qui se fragmentent. L'étude menée grâce au code SDFS a permis de mettre en évidence trois états : d'abord une surpression, puis un comportement transitoire permettant enfin d'atteindre le comportement asymptotique. Le premier état est caractérisé par les particules mères avant leur fragmentation, tandis que les deux autres sont caractérisés par les particules filles. L'étude a aussi démontré que le comportement asymptotique était fortement caractérisé par les vitesses des particules filles et peu par leurs diamètres. Enfin, il a été proposé une amélioration du modèle en modifiant le coefficient de traînée pour prendre en compte d'éventuels effets d'aspiration entre les particules. Cette piste a mené à une très bonne restitution de la pression observée expérimentalement. Néanmoins, l'observable étant globale (la pression) et les paramètres étant nombreux (diamètres, vitesses et coefficient de traînée des particules filles), il est difficile d'affirmer que les triplets proposés caractérisent l'expérience. L'étude menée est une base pour de futurs travaux afin d'améliorer la compréhension de cette expérience complexe.

Le second comportement, issu d'une expérience menée à Boeing [17, 25] met en évidence la déformation d'un choc détaché due à la présence de particules. Nous avons montré que le modèle proposé permettait de reproduire, au moins qualitativement, les observations expérimentales, à condition de reprendre l'hypothèse de Hulin et Znaty [44] sur l'influence des particules sur la production de turbulence. L'étude devra cependant être poursuivie car les résultats des simulations dépendent de manière sensible des modèles choisis pour traiter la production de turbulence par les particules et leur interaction avec

les parois, alors que ce sont des phénomènes mal connus en particulier dans les conditions d'écoulement traitées ici.

Conclusion et perspective

Conclusion

Les travaux présentés dans ce manuscrit portent sur l'étude de l'interaction d'un brouillard avec un choc en régime supersonique. L'approche eulérienne a été utilisée car elle est particulièrement adaptée aux machines fortement parallèles. Un module nommé SDFS (Supersonic Dilute Flow Solver), permettant de modéliser le comportement du brouillard, a été créé au sein d'un code d'aérodynamique du CEA et validé. Les travaux ont porté sur trois aspects de la modélisation numérique : l'étude et la création de nouveaux modèles, l'implémentation numérique et la validation sur des cas académiques, et enfin la confrontation à des résultats expérimentaux.

Dans le cas monophasique tout d'abord, une étude des effets de gaz réels sur la distance de choc a été menée et a abouti à l'élaboration d'une formule explicite permettant de calculer la distance de choc pour un obstacle assimilable localement à une sphère. Cette formule peut être considérée comme une extension de la formule usuelle de Billig pour les écoulements à haute température.

Dans le cas diphasique, nous avons proposé un modèle eulérien multi-classes pour la phase dispersée adapté à l'importance relative de chaque phénomène à l'échelle particulaire. Le système d'équations proposé a été établi à partir de l'équation de Williams-Boltzmann et nous avons clairement mis en évidence les hypothèses nécessaires à l'obtention du système.

Concernant la discrétisation numérique, nous avons retenu pour sa simplicité et généralité la méthode des volumes finis avec un schéma d'ordre 2 décentré pour la discrétisation des flux et une méthode semi-implicite pour l'intégration temporelle. Nous avons montré que ce schéma permet de préserver la positivité de la concentration en nombre de la phase

particulaire ainsi que le principe du maximum sur la masse, la vitesse, la température et le facteur de forme des particules.

La modélisation du phénomène de fragmentation de gouttes liquides en régime supersonique a fait l'objet d'une attention particulière. Deux nouveaux modèles ont été proposés dont un qui est a priori beaucoup plus précis que les modèles existants mais qui, étant basé sur des expériences toujours en cours, n'a pas encore pu être calibré et validé. L'autre modèle a en revanche pu être testé et appliqué avec succès à la simulation d'une expérience réalisée par A. Chauvin mettant en jeu le phénomène d'interaction d'un brouillard avec une onde de choc.

Enfin, le modèle développé dans la thèse a été appliqué à la restitution d'une expérience réalisée par Boeing dans les années 1970, mettant en évidence un phénomène de déstabilisation d'un choc détaché par la présence de particules solides dans l'écoulement. Nous avons montré qu'il était possible de reproduire ce phénomène par la simulation numérique et avons réalisé une étude paramétrique afin de dégager des pistes de recherche pour mieux comprendre les mécanismes physiques en jeu dans le déclenchement des instabilités.

Perspectives

Les travaux présentés dans ce manuscrit peuvent être prolongés dans plusieurs directions.

Le nouveau modèle de fragmentation basé sur les expériences en cours réalisées au laboratoire P' de Poitiers doit encore être calibré pour pouvoir être utilisé d'un point de vue opérationnel, en se servant des résultats expérimentaux et de résultats de simulation numérique directe. Une fois cette étape effectuée, il serait intéressant de confronter les résultats obtenus avec ce modèle à ceux issus d'autres modèles de la littérature, en particulier ceux étudiés dans le manuscrit.

L'étude de la dépression observée par A. Chauvin ne permet pas, à elle seule, de caractériser la fragmentation des particules. En effet, il est difficile d'extraire des informations précises sur le comportement des particules alors que les grandeurs mesurées expérimentalement sont uniquement relatives à la pression de la phase gazeuse en différents points. La réalisation d'expériences complémentaires utilisant d'autres diagnostics, comme la vélocimétrie laser ou la PIV par exemple, permettrait d'obtenir des informations sur la vitesse des particules et ainsi de mieux caractériser le phénomène de fragmentation.

Pour finir, l'étude menée sur l'expérience réalisée par Boeing pourrait être complétée d'un point de vue théorique et expérimental. D'un point de vue théorique, il serait intéressant de mieux comprendre l'influence des particules sur la production de turbulence dans le fluide. A notre connaissance, ce type d'étude n'a jamais été réalisé dans le cas de particules en régime supersonique. D'un point de vue expérimental, les expériences pourraient être reproduites en mesurant le taux de turbulence au niveau du choc. Ces travaux permettraient de valider ou infirmer les hypothèses que nous avons effectuées pour restituer l'expérience de Boeing.

Annexe 1

Nous ne considérons que l'équation de la masse, les autres équations s'obtenant de la même façon. Partons de l'équation initiale :

$$\frac{\partial}{\partial t} (n m_p) + \nabla_{\mathbf{x}}(n m_p \bar{\mathbf{v}}) + m_p \frac{\partial}{\partial d_p} (n \Psi_d) = Q^2 \quad (5.12)$$

Multiplions maintenant cette expression par une fonction $\varphi(d)$ régulière telle que $\varphi(0) = 0$ et $\varphi(d) = 0$ pour d très grand. (5.12) devient :

$$(5.12) \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathbb{R}^+} n m_p \varphi(d) dd + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\int_{\mathbb{R}^+} n m_p \bar{\mathbf{v}} \varphi(d) dd \right) - \int_{\mathbb{R}^+} [m_p(d) \varphi]' n \Phi_d dd = \int_{\mathbb{R}^+} Q^2 \varphi(d) dd \quad (5.13)$$

En utilisant l'expression de n :

$$n(t, x, d_p) = \sum_{i=1}^N n_i(t, \mathbf{x}) \delta_{d_p - d_i(t, \mathbf{x})} \quad (5.14)$$

l'équation (5.12) devient :

$$(5.12) \Rightarrow \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial t} (n_i m_i) \varphi(d_i) + \sum_{i=1}^N \nabla_{\mathbf{x}} (n_i m_i \mathbf{v}_i) \varphi(d_i) - \sum_{i=1}^N n_i m_p'(d_i) \Phi_d^i \varphi(d_i) - \sum_{i=1}^N n_i m_p(d_i) \Phi_d^i \varphi'(d_i) = \sum_{i=1}^N Q_2^i \varphi(d) dd \quad (5.15)$$

Comme φ est arbitraire, nous pouvons imposer que $\varphi'(d_i) = 0$ pour tout i et que $\varphi(d_i) = 0$ sauf pour $i = i_0$ fixé. Nous en déduisons alors l'équation sur la masse du système (4.40) pour la classe i_0 .

Annexe 2

Nous allons décrire les étapes de calcul permettant d'écrire le système couplé en fonction des densités, vitesses et pression. Le système couplé initial est le suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial x} (\rho_1 u_1) = \frac{\rho_2}{\tau_{th}} \end{array} \right. \quad (5.16a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial x} (\rho_2 v_2) = -\frac{\rho_2}{\tau_{th}} \end{array} \right. \quad (5.16b)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial x} (\rho_1 u_1^2 + p_1) = \frac{\rho_2}{\tau_{dy}} (v_2 - u_1) + \frac{\rho_2 v_2}{\tau_{th}} \end{array} \right. \quad (5.16c)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial x} (\rho_2 v_2^2) = -\frac{\rho_2}{\tau_{dy}} (v_2 - u_1) - \frac{\rho_2 v_2}{\tau_{th}} \end{array} \right. \quad (5.16d)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho_1 u_1 \left(e_1 + \frac{u_1^2}{2} \right) + p_1 u_1 \right) = \frac{\rho_2 (v_2 - u_1) v_2}{\tau_{dy}} + \frac{\rho_2}{\tau_{th}} \left(\frac{v_2^2}{2} \right) \end{array} \right. \quad (5.16e)$$

Commençons par écrire le système couplé en fonction de l'énergie interne du mélange et non de son énergie totale. Pour cela, nous retranchons à l'équation (5.16e) la quantité u_1 x eq.(5.16c).

Regardons tout d'abord le terme de gauche de l'égalité, noté A . Nous allons dans un premier temps le développer. Ensuite, nous regrouperons les termes de pression et d'énergie interne, que nous noterons A_p et, les termes dynamiques que nous noterons A_{dy} :

$$\begin{aligned} A &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho_1 u_1 \left(e_1 + \frac{u_1^2}{2} \right) + p_1 u_1 \right) - u_1 \frac{\partial}{\partial x} (\rho_1 u_1^2 + p_1) \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho_1 u_1 e_1 + \rho_1 \frac{u_1^3}{2} + p_1 u_1 \right) - u_1 \frac{\partial}{\partial x} (\rho_1 u_1^2) - u_1 \frac{\partial}{\partial x} p_1 \\ &= A_p + A_{dy} \end{aligned} \quad (5.17)$$

Commençons par les termes de pression et d'énergie interne :

$$\begin{aligned}
 A_p &= \frac{\partial}{\partial x} (\rho_1 u_1 e_1 + p_1 u_1) - u_1 \frac{\partial}{\partial x} p_1 \\
 &= \frac{1}{\gamma - 1} \frac{\partial}{\partial x} (p_1 u_1) + \frac{\partial}{\partial x} (p_1 u_1) - u_1 \frac{\partial}{\partial x} p_1 \\
 &= \frac{1}{\gamma - 1} \frac{\partial}{\partial x} (p_1 u_1) + p_1 \frac{\partial}{\partial x} u_1 \\
 &= \frac{\gamma}{\gamma - 1} p_1 \frac{\partial}{\partial x} u_1 + \frac{1}{\gamma - 1} u_1 \frac{\partial}{\partial x} p_1
 \end{aligned} \tag{5.18}$$

Puis les termes dynamiques :

$$\begin{aligned}
 A_{dy} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho_1 \frac{u_1^3}{2} \right) - u_1 \frac{\partial}{\partial x} (\rho_1 u_1^2) \\
 &= \rho_1 \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{u_1^3}{2} - u_1 \frac{\partial}{\partial x} u_1^2 \right) + \frac{\partial}{\partial x} \rho_1 \left(\frac{u_1^3}{2} - u_1^3 \right) \\
 &= -\frac{\rho_1 u_1^2}{2} \frac{\partial}{\partial x} u_1 - \frac{u_1^3}{2} \frac{\partial}{\partial x} \rho_1 \\
 &= -\frac{u_1^2}{2} \left(\rho_1 \frac{\partial}{\partial x} u_1 + u_1 \frac{\partial}{\partial x} \rho_1 \right) \\
 &= -\frac{u_1^2}{2} \frac{\partial}{\partial x} (\rho_1 u_1)
 \end{aligned} \tag{5.19}$$

Le terme de droite de l'égalité, noté B vaut :

$$\begin{aligned}
 B &= \frac{\rho_2 (v_2 - u_1) v_2}{\tau_{dy}} + \frac{\rho_2 v_2^2}{2 \tau_{th}} - u_1 \left(\frac{\rho_2}{\tau_{dy}} (v_2 - u_1) + \frac{\rho_2 v_2}{\tau_{th}} \right) \\
 &= \frac{\rho_2 (v_2 - u_1)^2}{\tau_{dy}} + \frac{\rho_2}{\tau_{th}} \left(\frac{v_2^2}{2} - u_1 v_2 \right)
 \end{aligned} \tag{5.20}$$

Ce qui nous permet de réécrire l'équation en énergie interne :

$$\frac{\gamma}{\gamma - 1} p_1 \frac{\partial}{\partial x} u_1 + \frac{1}{\gamma - 1} u_1 \frac{\partial}{\partial x} p_1 - \frac{u_1^2}{2} \frac{\partial}{\partial x} (\rho_1 u_1) = \frac{\rho_2 (v_2 - u_1)^2}{\tau_{dy}} + \frac{\rho_2}{\tau_{th}} \left(\frac{v_2^2}{2} - u_1 v_2 \right) \tag{5.21}$$

En utilisant l'équation (5.16a) nous obtenons :

$$\frac{\gamma}{\gamma - 1} p_1 \frac{\partial}{\partial x} u_1 + \frac{1}{\gamma - 1} u_1 \frac{\partial}{\partial x} p_1 - \frac{u_1^2}{2} \frac{\rho_2}{\tau_{th}} = \frac{\rho_2 (v_2 - u_1)^2}{\tau_{dy}} + \frac{\rho_2}{\tau_{th}} \left(\frac{v_2^2}{2} - u_1 v_2 \right) \tag{5.22}$$

Soit encore :

$$\frac{\gamma}{\gamma - 1} p_1 \frac{\partial}{\partial x} u_1 + \frac{1}{\gamma - 1} u_1 \frac{\partial}{\partial x} p_1 = \rho_2 (v_2 - u_1)^2 \left(\frac{1}{\tau_{dy}} + \frac{1}{2\tau_{th}} \right) \tag{5.23}$$

Bibliographie

- [1] Pascal Achim. *Simulation de collisions, coalescence et rupture de gouttes par une approche Lagrangienne : application aux moteurs à propergol solide*. PhD thesis, 1999. (Cité p.62)
- [2] John David Anderson. *Hypersonic and high temperature gas dynamics*. Aiaa, 2000. (Cité pp.ix, 3, 6, 9, 10, 12, 13 et 14)
- [3] W Kyle Anderson, James Lee Thomas, and Bram Van Leer. Comparison of finite volume flux vector splittings for the euler equations. *AIAA journal*, 24(9) :1453–1460, 1986. (Cité pp.84 et 90)
- [4] Bertrand Aubert. *Etude du comportement sous sollicitations dynamiques intenses des matériaux carbonés : analogie entre irradiations laser et impacts hypervéloces*. PhD thesis, Art et métiers ParisTech, 2018. (Cité pp.166 et 201)
- [5] Frederick S Billig. Shock-wave shapes around spherical-and cylindrical-nosed bodies. *Journal of Spacecraft and Rockets*, 4(6) :822–823, 1967. (Cité pp.ii et 28)
- [6] Olivier Boisneau. *Étude du comportement de gouttes dans un champ acoustique intense : applications aux instabilités de combustion HF dans les moteurs-fusées*. PhD thesis, Toulouse,ENSAE, 2003. (Cité p.45)
- [7] AA Borisov, BE Gel’Fand, SA Gubin, SM Kogarko, and OV Krivenko. Attenuation of shock waves in a two-phase gas—liquid medium. *Fluid Dynamics*, 6(5) :892–897, 1971. (Cité p.i)
- [8] RS Brodkey. The phenomena of fluid motions, chapt. 14, 1967. (Cité p.152)
- [9] R. Brun. *Transport et relaxation dans les écoulement gazeux*. 1986. (Cité p.15)
- [10] Raymond Brun. *Introduction à la dynamique des gaz réactifs*. 2006. (Cité pp.3, 8 et 9)
- [11] A Chauvin, E Daniel, A Chinnayya, J Massoni, and G Jourdan. Shock waves in sprays : numerical study of secondary atomization and experimental comparison. *Shock waves*, 26(4) :403–415, 2016. (Cité pp.i, iv, 149, 181 et 197)
- [12] A Chauvin, G Jourdan, E Daniel, L Houas, and R Tosello. Experimental investigation of the propagation of a planar shock wave through a two-phase gas-liquid medium. *Physics of fluids*, 23(11) :113301, 2011. (Cité p.i)
- [13] Alice Chauvin. *Etude expérimentale de l’atténuation d’une onde de choc par un nuage de gouttes et validation numérique*. PhD thesis, Aix-Marseille, 2012. (Cité pp.xi, xii, xvii, i, iv, 149, 150, 151, 181, 182 et 184)

- [14] Richard Courant, Kurt Friedrichs, and Hans Lewy. Über die partiellen differenzgleichungen der mathematischen physik. *Mathematische annalen*, 100(1) :32–74, 1928. (Cit e p.93)
- [15] C Desmeuzes, G Duffa, and B Dubroca. Different levels of modeling for diffusion phenomena in neutral and ionized mixtures. *Journal of thermophysics and heat transfer*, 11(1) :36–44, 1997. (Cit e p.20)
- [16] G Dufour. *Mod elisation multi-fluide eul erienne pour les  coulements diphasiques a inclusions dispers es*. PhD thesis, PhD thesis, Universit  Paul Sabatier Toulouse III, 2005. (Cit e pp.45 et 73)
- [17] Lyle E Dui bar, Joseph F Courtney, and Lowell D McMillen. Heating augmentation in erosive hypersonic environments. *AIAA Journal*, 13(7) :908–912, 1975. (Cit e pp.xiii, ii, iv, 181, 198, 199 et 227)
- [18] John K Dukowicz. A particle-fluid numerical model for liquid sprays. *Journal of computational Physics*, 35(2) :229–253, 1980. (Cit e p.ii)
- [19] Michael G Dunn and S Kang. Theoretical and experimental studies of reentry plasmas. 1973. (Cit e p.12)
- [20] John K Eaton. Two-way coupled turbulence simulations of gas-particle flows using point-particle tracking. *International Journal of Multiphase Flow*, 35(9) :792–800, 2009. (Cit e p.217)
- [21] Masson et Cie. *Thermodynamique chimique*. 1969. (Cit e p.3)
- [22] Landau L et Lifchitz E. *Physique th orique*. 1989. (Cit e p.16)
- [23] Iain Finnie. Erosion of surfaces by solid particles. *wear*, 3(2) :87–103, 1960. (Cit e p.58)
- [24] Iain Finnie. Some observations on the erosion of ductile metals. *wear*, 19(1) :81–90, 1972. (Cit e p.58)
- [25] W FLEENER and R WATSON. Convective heating in dust-laden hypersonic flows. In *8th Thermophysics Conference*, page 761, 1973. (Cit e pp.xiii, ii, iv, 181, 198, 199 et 227)
- [26] TW Fox, CW Rackett, and JA Nicholls. Shock wave ignition of magnesium powders. 1978. (Cit e p.53)
- [27] Godsave GAE. Studies of the combustion of drops in a fuel spray-the burning of single drops of fuel. volume 4, pages 818–830. Elsevier, 1953. (Cit e p.53)

- [28] BE Gelfand. Droplet breakup phenomena in flows with velocity lag. *Progress in energy and combustion science*, 22(3) :201–265, 1996. (Cité p.65)
- [29] RA Gore and Clayton T Crowe. Effect of particle size on modulating turbulent intensity. *International Journal of Multiphase Flow*, 15(2) :279–285, 1989. (Cité p.217)
- [30] Céline Grandmont, Yvon Maday, and Bertrand Maury. A multiscale/multimodel approach of the respiration tree. new trends in continuum mechanics. *Theta Ser Adv. Math*, 3 :147–157, 2005. (Cité p.i)
- [31] G Grant, J Brenton, and D Drysdale. Fire suppression by water sprays. *Progress in energy and combustion science*, 26(2) :79–130, 2000. (Cité p.i)
- [32] JB Greenberg, I Silverman, and Y Tambour. On the origins of spray sectional conservation equations. *Combustion and flame*, 93(1-2) :90–96, 1993. (Cité p.76)
- [33] Etienne Guyon, Jean-Pierre Hulin, Luc Petit, and Pierre Gilles Gennes. *Hydrodynamique physique*. EDP sciences Les Ulis, 2001. (Cité p.46)
- [34] C Habchi, D Verhoeven, C Huynh Huu, L Lambert, JL Vanhemelryck, and T Baritaud. Modeling atomization and breakup in high-pressure diesel sprays. Technical report, SAE Technical Paper, 1997. (Cité p.61)
- [35] Ami Harten. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *Journal of computational physics*, 49(3) :357–393, 1983. (Cité p.90)
- [36] Amiram Harten, Peter D Lax, and Bram van Leer. On upstream differencing and godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws. *SIAM review*, 25(1) :35–61, 1983. (Cité p.89)
- [37] Tobias Hauk, Elmar Bonaccorso, Philippe Villedieu, and Pierre Trontin. Theoretical and experimental investigation of the melting process of ice particles. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 30(4) :946–954, 2016. (Cité p.45)
- [38] Charles B Henderson. Drag coefficients of spheres in continuum and rarefied flows. *AIAA journal*, 14(6) :707–708, 1976. (Cité p.47)
- [39] G Hetsroni. Particles-turbulence interaction. *International Journal of Multiphase Flow*, 15(5) :735–746, 1989. (Cité p.217)
- [40] Russell Charles Hibbeler. *Engineering mechanics*. Pearson education, 2001. (Cité p.58)
- [41] L-P Hsiang and GM Faeth. Near-limit drop deformation and secondary breakup. *International journal of multiphase flow*, 1992. (Cité pp.65, 66 et 161)

- [42] <http://exploration.esa.int/mars/49134-edm-thermal-protection-system/>. (Cit  p.i)
- [43] <http://exploration.esa.int/mars/57828-a-stormy-arrival-for-schiaparelli/>. (Cit  p.i)
- [44] A Hulin and E Znaty. Aerodynamic modelling of hypersonic erosive reentry flows. In *Aerothermodynamics for space vehicles*, volume 367, page 391, 1995. (Cit  pp.vi, xiii, iv, 179, 199, 201 et 227)
- [45] Jouke Hylkema. *Mod lisation cin tique et simulation num rique d'un brouillard dense de gouttelettes. Application aux propulseurs   poudre*. PhD thesis. (Cit  p.73)
- [46] Antony Jameson, Wolfgang Schmidt, and Eli Turkel. Numerical solution of the euler equations by finite volume methods using runge kutta time stepping schemes. In *14th fluid and plasma dynamics conference*, page 1259. (Cit  p.86)
- [47] A Jones and PF Nolan. Discussions on the use of fine water sprays or mists for fire suppression. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 8(1) :17–22, 1995. (Cit  p.i)
- [48] G Jourdan, L Biamino, C Mariani, C Blanchot, E Daniel, J Massoni, L Houas, R Tosello, and D Praguine. Attenuation of a shock wave passing through a cloud of water droplets. *Shock Waves*, 20(4) :285–296, 2010. (Cit  p.i)
- [49] G Jourdan, L Houas, O Igra, J-L Estivalezes, C Devals, and EE Meshkov. Drag coefficient of a sphere in a non-stationary flow : new results. In *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, volume 463, pages 3323–3345. The Royal Society, 2007. (Cit  p.183)
- [50] Claire Laurent. *D veloppement et validation de mod les d' vaporation multi-composant*. PhD thesis, 2008. (Cit  p.54)
- [51] Fr d rique Laurent. *Mod lisation math matique et num rique de la combustion de brouillards de gouttes polydispers s*. PhD thesis, Universit  Claude Bernard-Lyon I, 2002. (Cit  p.76)
- [52] Fr d rique Laurent and Marc Massot. Multi-fluid modelling of laminar polydisperse spray flames : origin, assumptions and comparison of sectional and sampling methods. *Combustion theory and modelling*, 5(4) :537–572, 2001. (Cit  pp.iii, 73 et 76)
- [53] C David Levermore. Moment closure hierarchies for kinetic theories. *Journal of statistical Physics*, 83(5-6) :1021–1065, 1996. (Cit  p.74)
- [54] R KENNETH LOBB. Experimental measurement of shock detachment distance on spheres fired in air at hypervelocities. In *AGARDograph*, volume 68, pages 519–527. Elsevier, 1964. (Cit  p.30)

- [55] G Marois, P Villedieu, and J Mathiaud. Euler-euler modelling of the interaction of a gas-particle mixture with a detached shock. 2018. (Cité p.102)
- [56] Benjamin Mauroy. Hydrodynamique dans le poumon, relations entre flux et géométries. *Thesis in Mathematics, Ecole normale supérieure de Cachan*, 2004. (Cité p.i)
- [57] JR Mawhinney and JK Richardson. A review of water mist fire suppression research and development, 1996. *Fire Technology*, 33(1) :54–90, 1997. (Cité p.i)
- [58] Riber Iskanderovitch Nigmatlutin. *Dynamic of multiphase media*. CRC Press, 1990. (Cité p.65)
- [59] Peter J O'Rourke and Anthony A Amsden. The TAB method for numerical calculation of spray droplet breakup. Technical report, SAE Technical Paper, 1987. (Cité pp.62, 66 et 161)
- [60] Chassaing P. *Mécaniques des fluides*. 1995. (Cité p.16)
- [61] M Pilch and CA Erdman. Use of breakup time data and velocity history data to predic the maximum size of stable fragments for acceleration-induced breakup of a liquid drop. *International journal of multiphase flow*, 1987. (Cité pp.x, 63, 65, 66, 152, 161 et 182)
- [62] Martin Pilch, CA Erdman, and Albert Barnett Reynolds. *Acdeleration induced fragmentation of liduis drops*. The Comission, 1981. (Cité pp.xi et 139)
- [63] Clift R, Grace JR, and Weber M3. Bubbles, drops and particles. *Academie,New York*, 1978. (Cité p.46)
- [64] WE Ranz, W R_ Marshall, et al. Evaporation from drops. *Chem. Eng. Prog*, 48(3) :141–146, 1952. (Cité p.52)
- [65] W Reinecke and G Waldman. Shock layer shattering of cloud drops in reentry flight. In *13th Aerospace Sciences Meeting*, page 152, 1975. (Cité pp.xi, iv, 140 et 142)
- [66] WG Reinecke and WL McKay. Experiments on water drop breakup behind mach 3 to 12 shocks. Technical report, Avco Corp., Wilmington, Mass. Avco Government Products Group, 1969. (Cité pp.xi et 141)
- [67] WG Reinecke and GD Waldman. A study of drop breakup behind strong shocks with applications to flight. Technical report, AVCO SYSTEMS DIV WILMINGTON MA, 1970. (Cité pp.xi, iv, 140, 141 et 143)
- [68] Rolf D Reitz and R Diwakar. Effect of drop breakup on fuel sprays. Technical report, SAE Technical Paper, 1986. (Cité p.61)

- [69] Philip L Roe. Approximate riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes. *Journal of computational physics*, 43(2) :357–372, 1981. (Cit e p.89)
- [70] Philip L Roe. Characteristic-based schemes for the euler equations. *Annual review of fluid mechanics*, 18(1) :337–365, 1986. (Cit e p.88)
- [71] M Ruger, S Hohmann, Martin Sommerfeld, and Gangolf Kohnen. Euler/lagrange calculations of turbulent sprays : the effect of droplet collisions and coalescence. *Atomization and sprays*, 10(1), 2000. (Cit e p.59)
- [72] Marl ene Sanjos e. *Evaluation de la m ethode Euler-Euler pour la simulation aux grandes  echelles des chambres   carburant liquide*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2009. (Cit e p.54)
- [73] John D Schwarzkopf, Martin Sommerfeld, Clayton T Crowe, and Yutaka Tsuji. *Multiphase flows with droplets and particles*. CRC press, 2011. (Cit e pp.ii, 45 et 59)
- [74] Olivier Simonin. Statistical and continuum modelling of turbulent reactive particulate flows. *Lecture series*, 6, 2000. (Cit e p.217)
- [75] William A Sirignano. Fuel droplet vaporization and spray combustion theory. *Progress in Energy and Combustion Science*, 9(4) :291–322, 1983. (Cit e p.i)
- [76] William A Sirignano. *Fluid dynamics and transport of droplets and sprays*. Cambridge university press, 1999. (Cit e p.52)
- [77] M Sommerfeld and N Huber. Experimental analysis and modelling of particle-wall collisions. *International journal of multiphase flow*, 25(6-7) :1457–1489, 1999. (Cit e p.58)
- [78] Dudley Brian Spalding. The combustion of liquid fuels. volume 4, pages 847–86. Elsevier, 1953. (Cit e p.53)
- [79] William Sutherland. Lii. the viscosity of gases and molecular force. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 36(223) :507–531, 1893. (Cit e p.16)
- [80] CE Swain. The effect of particle/shock layer interaction on reentry vehicle performance. 1975. (Cit e p.47)
- [81] Nouredine Taguelmimt. *Etude num erique de l' coulement de couche de m elange temporelle   viscosit e variable*. PhD thesis, INSA de Rouen, 2015. (Cit e p.19)
- [82] Yoram Tambour. A lagrangian sectional approach for simulating droplet size distribution of vaporizing fuel sprays in a turbulent jet. *Combustion and flame*, 60(1) :15–28, 1985. (Cit e p.76)

- [83] Kevin W Thompson. Time dependent boundary conditions for hyperbolic systems. *Journal of computational physics*, 68(1) :1–24, 1987. (Cit e p.102)
- [84] Kevin W Thompson. Time-dependent boundary conditions for hyperbolic systems, ii. *Journal of computational physics*, 89(2) :439–461, 1990.
- [85] Eleuterio F Toro. *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics : a practical introduction*. Springer Science & Business Media, 2013. (Cit e pp.84, 90 et 102)
- [86] <http://perso.ensta-paristech.fr/~ortiz/DFR/Voies/chapVmf201.pdf>. (Cit e pp.ix et 4)
- [87] Bram Van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme. *Journal of Computational Physics*, 135(2) :229–248, 1997. (Cit e pp.87 et 88)
- [88] Bram Van Leer, James L Thomas, Philip L Roe, and Richard W Newsome. A comparison of numerical flux formulas for the euler and navier-stokes equations. 1987. (Cit e pp.84 et 90)
- [89] Philippe Villedieu and Jouke Hylkema. Une m ethode particulière al eatoire reposant sur une  equation cin etique pour la simulation num erique des sprays denses de gouttelettes liquides. *Comptes Rendus de l'Acad emie des Sciences-Series I-Mathematics*, 325(3) :323–328, 1997. (Cit e p.73)
- [90] Philippe Villedieu, Pierre Trontin, and R emi Chauvin. Glaciated and mixed phase ice accretion modeling using onera 2d icing suite. In *6th AIAA Atmospheric and Space Environments Conference*, page 2199, 2014. (Cit e p.45)
- [91] FA Williams. Spray combustion theory. *Combustion and Flame*, 3 :215–228, 1959. (Cit e p.i)
- [92] Forman A Williams. *Combustion theory*. Addison-Wesley Publishing Compagny, 1985. (Cit e pp.i et iii)
- [93] MR Wool. Passive nosetip technology (pant) program. Technical report, ACUREX CORP/AEROTHERM MOUNTAIN VIEW CA, 1975. (Cit e p.16)
- [94] Helen C Yee. A class of high resolution explicit and implicit shock-capturing methods. 1989. (Cit e p.94)

Titre : Modélisation eulérienne de l'interaction d'un brouillard avec un choc en régime supersonique

Mots clés : écoulements supersoniques, écoulements multiphasiques, mathématiques appliquées, calcul scientifique

Résumé : Les travaux présentés dans cette thèse portent sur l'interaction d'un brouillard avec un choc en régime supersonique. L'approche eulérienne a été utilisée car elle est particulièrement adaptée aux machines fortement parallèles. Un module nommé SDFS (Supersonic Dilute Flow Solver), permettant de modéliser le comportement du brouillard, a été créé et validé au sein d'un code d'aérodynamique du CEA. Les travaux ont porté sur trois aspects de la modélisation numérique. Premièrement, l'étude et la création de nouveaux modèles. Deuxièmement, l'implémentation numérique et la validation sur des cas académiques de référence. Enfin, la confrontation entre les résultats numériques et des données expérimentales issues de la littérature.

Title : Euler-Euler modelling of the interaction between a supersonic dilute flow and a detached shock

Key words : supersonic flow, multiphases flow, applied mathematics, computational simulation

Summary : In this thesis we focus on the interaction between a supersonic dilute flow and a detached shock. The Eulerian approach has been chosen because it is particularly adapted to parallel computing. A program named SDFS (Supersonic Dilute Flow Solver), was created and validated in a CEA aerodynamic code. Three aspects of the computational simulation have been studied. First the study and creation of new models. Then the numerical implementation and the validation through academic reference cases. Finally, the comparison between numerical results and experimental data.