



Evaluation de la méthode Euler-Euler pour la simulation aux grandes échelles des chambres à carburant liquide

Marlène Sanjosé

► To cite this version:

Marlène Sanjosé. Evaluation de la méthode Euler-Euler pour la simulation aux grandes échelles des chambres à carburant liquide. Dynamique des Fluides [physics.flu-dyn]. Institut National Polytechnique de Toulouse - INPT, 2009. Français. NNT : 2009INPT066H . tel-04401111v2

HAL Id: tel-04401111

<https://theses.hal.science/tel-04401111v2>

Submitted on 17 Jan 2024

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 Polytechnique de Toulouse*
Discipline ou spécialité : *Dynamique des Fluides*

Présentée et soutenue par : *Marlène SANJOSE*
Le 14 décembre 2009

Titre :
*Evaluation de la méthode Euler-Euler pour la simulation
aux grandes échelles des chambres à carburant liquide*

JURY

<i>Julien Réveillon</i>	<i>Professeur de l'université de Rouen, CORIA</i>	<i>Rapporteur</i>
<i>Chawki Habchi</i>	<i>Ingénieur de recherche à l'IFP</i>	<i>Rapporteur</i>
<i>Gérard Lavergne</i>	<i>Professeur à l'ISAE, ONERA-Toulouse</i>	<i>Examineur</i>
<i>Thomas Lederlin</i>	<i>Ingénieur à Turbomeca</i>	<i>Examineur</i>
<i>Thierry Poinot</i>	<i>Directeur de recherche à l'IMFT</i>	<i>Examineur</i>
<i>Renaud Lecourt</i>	<i>Ingénieur de recherche à l'ONERA-Fauga</i>	<i>Invité</i>
<i>Yann Doutreleau</i>	<i>Directeur scientifique à l'ENSIETA</i>	<i>Invité</i>
<i>Bénédicte Cuenot</i>	<i>Chercheur sénior au CERFACS</i>	<i>Directrice de thèse</i>

Ecole doctorale : *Mécanique, Energétique, Génie civil, Procédés*
Unité de recherche : *CERFACS - CFD Team*
Directrice de thèse : *Bénédicte Cuenot*
Co-directeur de thèse : *Olivier Vermorel*

Référence CERFACS : *TH-CFD-09-108*

Résumé

Les turbines aéronautiques doivent satisfaire à des normes d'émissions polluantes toujours en baisse. La qualité du mélange du carburant et de l'air dans la chambre de combustion est responsable de la formation de polluants nocifs pour l'environnement. La simulation aux grandes échelles (LES) permet d'étudier les mécanismes de mélanges turbulents de l'air et du carburant. La prise en compte de l'aspect liquide du carburant injecté devient nécessaire pour prédire correctement l'apparition de vapeur de carburant au sein du foyer.

Le but de cette thèse est évaluer la fiabilité des simulations LES Euler-Euler dans une configuration complexe. Les processus d'injection, et d'évaporation du carburant liquide sont analysés et modélisés dans les simulations LES car ils pilotent la formation de vapeur de carburant. Les méthodes numériques pour résoudre les équations continues de la phase dispersée doivent permettre des simulations précises et robustes dans une configuration représentative d'une chambre de combustion. Les simulations présentées dans ces travaux reproduisent l'écoulement diphasique évaporant non-réactif du banc d'essai MERCATO. Ce banc est équipé d'un système d'injection d'air vrillé et d'un atomiseur pressurisé-swirlé de kérosène typiques des foyers aéronautiques réels.

Dans ces travaux, le modèle pour l'injection de liquide FIM-UR a été développé pour définir les conditions limites conduisant à un spray issu d'un atomiseur pressurisé-swirlé. Le kérosène employé dans les campagnes expérimentales est modélisé dans les simulations par un composé permettant d'obtenir des temps d'évaporation réalistes. Trois stratégies numériques ont été mises en place sur la configuration MERCATO. Les comparaisons des résultats numériques aux mesures expérimentales ont permis d'évaluer la stratégie numérique conduisant à la meilleure précision. L'utilisation du schéma centré TTGC associé à un opérateur de viscosité artificielle localisée par un senseur adapté est optimale lorsque l'équation sur l'énergie décorrélée des gouttes est résolue. Cette stratégie permet de contrôler la localisation et les niveaux de viscosité par rapport à un schéma décentré. Les termes sources liés au mouvement mésoscopique permettent de redistribuer l'énergie dans les zones de compression ou de détente de la phase dispersée, et d'obtenir les bonnes répartitions des fluctuations dans la chambre de combustion. La stratégie retenue est comparée aux statistiques de la dynamique du spray résolu par une approche Lagrangienne employant la même injection monodispersée. Le méthode Euler-Euler conduit à la même précision de la dynamique de la phase dispersée que la méthode Euler-Lagrange. L'accès à l'évolution instationnaire de l'écoulement permet d'identifier les mêmes mécanismes de dispersion et de mélange dans les deux simulations. Des différences sur la répartition de diamètre

moyen et de carburant dans la chambre ont été mis en évidence et reliés à la polydispersion locale qui n'est pas résolue dans l'approche Euler-Euler monodisperse et qui apparaît naturellement dans l'approche Euler-Lagrange malgré l'injection monodisperse.

Mots clés : Simulation aux grandes échelles, écoulement diphasique, approche Euler-Euler, injection liquide, évaporation, kérosène.

Abstract

Aeronautical gas turbines are facing growing demands on emission reductions. Indeed, the quality of the air-fuel mixture directly triggers the formation of pollutants degrading the environment. Large Eddy Simulation is an accurate numerical method to predict turbulent mixing in combustors. Adding the liquid phase of the fuel in these simulations also becomes necessary to properly predict the injection process and the vaporization of the fuel in the combustion chamber.

The purpose of this dissertation is to evaluate the accuracy and reliability of Euler-Euler LES in a complex combustor configuration. The injection and vaporization processes of the fuel liquid phase are both modeled in the present LES as they drive the formation of the fuel gas phase. Moreover, the numerical methods that solve the continuous equations of the disperse phase must be accurate and robust in realistic combustor configurations. The simulations shown in the present study reproduce the non-reactive two-phase flow of the ONERA MERCATO test bench. The experimental set-up is equipped with an air-swirler injection system and a pressure-swirled atomizer typical of actual turboengine combustors.

In the present work the FIM-UR liquid injection model has been developed. It creates boundary conditions profiles for a liquid spray produced by a pressure-swirled atomizer. Kerosene used in the experiments is modeled in the present numerical simulations by a single species leading to a good estimate of the vaporization rate. Three numerical strategies have been tested on the MERCATO configuration. Comparisons between experimental and LES results help defining the most accurate numerical strategy. The use of the centered numerical scheme TTGC stabilized by a localized artificial viscosity operator is best when the random uncorrelated energy of droplets is also resolved. Unlike an upwind numerical scheme, the selected strategy allows the user to control where and how much artificial viscosity is added. The source terms coming from the mesoscopic movement redistribute the energy in the compression or expanding zones of the disperse phase, and provide the proper distribution of fluctuations in the combustion chamber. The obtained strategy is compared with the statistics provided by a Lagrangian description of the liquid spray in the same mono-disperse injection. The Euler-Euler approach leads to the same accuracy in the same spray dynamics of the disperse phase as in the Euler-Lagrange method. Both unsteady flow simulations also provide the same dispersion and mixing processes in the MERCATO set-up. Differences on the mean diameter and the fuel distribution in the combustion chamber are seen and related to the local poly-dispersion that cannot be resolved in the mono-disperse Euler-Euler approach and that naturally appear in the

Euler-Lagrange method despite the mono-disperse injection.

Key words: Large eddy simulation, two-phase flow, Euler-Euler approach, liquid injection, vaporization, kerosene.

Remerciements

Je souhaite tout d'abord remercier la DGA qui m'a accordé une bourse de financement, et M. Yann Doutreleau pour l'intérêt qu'il a porté à mes travaux par sa présence lors de ma soutenance.

Je souhaite remercier les membres du jury qui ont accepté d'évaluer mon travail de thèse et de se déplacer à Toulouse (par une rare journée de neige !). Je remercie en particulier, Chawki Habchi pour l'application qu'il a porté dans son travail d'évaluation du manuscrit, Renaud Lecourt pour les nombreuses interactions que nous avons eues au cours de ces 3 années de travail sur la configuration MERCATO et Thomas Lederlin pour notre collaboration au CTR à Stanford à l'occasion du Summer Program 2008.

Je tiens à remercier Thierry Poinot pour l'opportunité qu'il m'a offerte de travailler au sein de l'équipe CFD du CERFACS. Il s'agit d'un environnement de travail assez exceptionnel où les nombreux thésards et chercheurs collaborent et interagissent, dans une ambiance formidable et un dynamisme rare qui doivent beaucoup à la personnalité de Thierry.

Je remercie chaleureusement Bénédicte Cuenot, directrice de thèse, qui m'a épaulée et soutenue dans les difficiles moments de doutes. Elle a su recadrer mon travail et me redonner de la motivation pour la "dernière ligne droite". Je la remercie pour les longues discussions à élaborer les scénarios qui permettent de comprendre les résultats observés. Je la remercie également pour son implication dans l'élaboration de ce manuscrit et son aide précieuse lors de la préparation de ma soutenance de thèse.

L'équipe CFD du CERFACS regroupe une cinquantaine de chercheurs et thésards avec qui j'ai eu beaucoup de plaisir à travailler, et à discuter de physique (Matthieu B. et L., Félix, Jean-Matthieu), de trucs et astuces informatiques (Marta, Gab', Anthony), de complots de manipulation de mondiale (Olivier C., Jorge), d'histoire et de faits d'armes célèbres (Laurent B.) ou encore des faits divers de la région toulousaine (Kerstin). Bien sûr il y a eu des moments difficiles où j'ai un peu perdu les pédales face à mon terminal qui n'en faisait qu'à sa tête, aussi je tiens à m'excuser auprès de mon clavier qui a souvent servi de défouloir pour mes nerfs, quand d'autres sont plus causants pour chasser leur nerfs (sacré Hugues !). Merci à Laurent B., Jean-Matthieu et Félix, mes collègues de bureau, qui ont su répondre à mes nombreuses questions et supporter mes sautes d'humeur !!

Remerciements

Je souhaite remercier Lionel Martinez et Aymeric Vié de l'IFP qui ont développé, codé et intégré les stratégies numériques qui ont permis de faire avancer d'une part mes travaux mais également les thésards qui travaillent sur la méthode Euler -Euler. Merci à Aymeric pour ses idées originales, ses commentaires toujours pertinents. Bravo à son efficacité redoutable pour coder !!

J'ai une pensée toute particulière pour la fine équipe de Stanford qui dépasse les limites du CERFACS et avec qui j'ai pu travailler dans une ambiance excellente : Matthieu, Florent, Laurent G. (Eléonore et Anthony à distance), Bénédicte, Thierry, Thomas, Vincent, Laurent S. (s'il te plait Lolo ne fait plus les choses à moitié !), Guillaume R., Franck, Stéphane (merci pour les visites guidées), Julien, Julian...

Au CERFACS, pour limiter la casse des claviers, il y a l'équipe CSG : ce sont des magiciens, des envoûteurs de machines... Merci donc à Fabrice, Gérard, Patrick, Isabelle et Nicolas, pour leur aide, leur bonne humeur et leur calme !! Je remercie également, Gabriel et Olivier V. pour le maintien du code AVBP, le développement d'outils bien sympathiques, leur travail de debugging, et le portage sur les derniers super-calculateurs.

Je remercie également Chantal et Michèle pour leurs rires qui résonnent dans tout le CERFACS à l'heure du café, Séverine pour sa gestion efficace de la Doc', Nicole et Marie pour l'ensemble des tâches qu'elles exécutent pour le bon fonctionnement de l'équipe CFD. J'ai apprécié partager quelques repas à la K'fêt avec elles, et également Sophie R., Marta, Roberto, Eric (non non tu ne m'auras pas avec ton Agar Agar), Azzam et bien d'autres ...

A côté du boulot, j'ai eu le rugby qui m'a permis d'évacuer ! Je remercie les gens formidables qui font vivre le TCMS, et les complices du terrain devenus de très chers amis : Olivia, Servane, Sandra, Arnaud, Didier, Audrey, Aude, ... Merci à cette grande famille Toulousaine !

Je souhaite remercier mes parents qui m'ont soutenue jusqu'au bout. Merci, entre autres, à maman pour les petits plats et les ourlets de mes pantalons, et à papa pour la coppa corse et le rosé !

Pour terminer je souhaite exprimer ma profonde gratitude à Stéphane, compagnon pendant plus d'un an, au gré de mes pics et trous de moral. Merci pour tes encouragements, merci de voir en moi des capacités que j'ignore. Ton aide (coaching, relecture, dérivations, conseils, ...) a été infiniment précieuse et sans elle je n'y serai pas arrivée ! "T'es-tu prêt à être mon chum ?"

Table des matières

Résumé	3
Abstract	5
Remerciements	7
1 Introduction Générale	13
1.1 Contexte de l'étude	13
1.2 Simulation numérique des écoulements diphasiques	14
1.3 Validation et vérification des codes numériques	18
1.4 Objectifs de cette thèse	22
1.5 Organisation du manuscrit	26
 Présentation des équations et modèles pour les écoulements turbu- lents diphasiques	 29
2 Équations de conservation pour les écoulements gazeux compressibles	33
2.1 Équations et variables conservatives	34
2.2 Thermodynamique du gaz	35
2.3 Modèle de transport et de diffusion	37

TABLE DES MATIÈRES

2.4	Équations LES pour la phase gazeuse	39
3	Équations de conservation pour la phase dispersée	45
3.1	Introduction	45
3.2	Fermeture des équations pour l'approche Eulérienne	51
3.3	Équations LES pour la phase dispersée	62
	Approche numérique pour la méthode Euler-Euler	71
	Introduction	73
4	Approche numérique dans AVBP	75
4.1	Introduction	75
4.2	Parallélisme et méthodes numériques	75
4.3	Conditions aux limites	79
5	Traitements numériques pour les équations de la phase liquide	81
5.1	Stratégies numériques pour les écoulements diphasiques dans les configura- tions complexes	81
5.2	Schémas numériques centrés et utilisation de viscosité artificielle pour la phase liquide	84
5.3	Capture de fronts	98
	Modélisation de la physique des écoulements diphasiques : évapora- tion et injection	107
	Introduction	109
6	Évaluation du modèle d'évaporation d'AVBP et application au kérosène	111

6.1	Présentation des différentes modélisations pour l'évaporation	112
6.2	Évaluation du modèle retenu dans AVBP	118
6.3	Modélisation du kérosène liquide	129
6.4	Évaluation de la modélisation du kérosène en évaporation	131
7	Injection liquide pour l'approche Euler-Euler	135
7.1	Introduction	136
7.2	Principles of the FIM-UR methodology	138
7.3	Building the injection profiles in the discharge orifice plane $x = x_0$	141
7.4	Spray evolution from $x = x_0$ to $x = x_i$	143
7.5	Model for air entrainment by a hollow-cone spray	148
7.6	Utilisation de FIM-UR avec l'approche Euler-Euler en configuration réelle .	152
	Simulation numérique aux grandes échelles de la configuration MER-	
	CATO à carburant liquide	159
	Introduction	161
8	Campagnes expérimentales sur la configuration MERCATO	163
8.1	Le banc d'essai MERCATO	163
8.2	Campagnes de mesures sur le banc MERCATO	165
9	Carburation de la chambre MERCATO	175
9.1	Paramètres numériques	176
9.2	Analyse de l'écoulement monophasique	186
9.3	Analyse de l'écoulement diphasique	199

TABLE DES MATIÈRES

10 Évaluation de la méthode Euler-Euler et des stratégies numériques	235
10.1 Comparaison des simulations Euler-Euler et Euler-Lagrange	236
10.2 Analyse des stratégies numériques pour la simulation Euler-Euler	249
10.3 Évaluation de la méthodologie FIM-UR	268
 Conclusions et perspectives	 271
 Bibliographie	 275
 Annexes	 291
 A Dynamique de la phase gazeuse résolue avec les schémas LW et TTGC	 291
 B Comparaison des fluctuations RMS de vitesse et de diamètre pour les deux débits	 295
 C Article publié dans les Comptes Rendus de l'Académie des Sciences	 297

Chapitre 1

Introduction Générale

1.1 Contexte de l'étude

Le secteur des transports est responsable d'une part importante des émissions de gaz à effet de serre et des polluants dans l'atmosphère. Les nouvelles normes environnementales fixent les taux d'émissions polluantes. Elles sont de plus en plus sévères et incitent les motoristes à concevoir des moteurs plus propres.

Plusieurs types d'espèces chimiques produites par le processus de combustion peuvent être regroupés sous le terme d'émissions polluantes. Les émissions de gaz à effet de serre sont les émissions prépondérantes et inévitables dans tous les procédés d'oxydation des carburants fossiles. Le dioxyde de carbone CO_2 et la vapeur d'eau H_2O sont les produits majoritaires de la combustion, et sont également les espèces chimiques qui contribuent le plus fortement à l'augmentation de l'effet de serre. Ces espèces chimiques retiennent en effet le rayonnement infrarouge qui contribue à l'augmentation de la température à la surface de la terre. Pour diminuer ces émissions, il s'agit de diminuer la consommation de carburant fossile. Si l'augmentation du rendement *global* des moteurs permet de diminuer la consommation de carburant pour une mission particulière, elle ne pourra pas compenser l'augmentation plus générale de la consommation d'énergie fossile due à l'augmentation du trafic aérien, routier et maritime liée à l'augmentation de la population, au développement économique de pays émergents, et à la mondialisation de la production, de l'économie, et du tourisme... L'amélioration du rendement global des moteurs aéronautiques se fait par une optimisation de chaque élément et étage de la turbine à gaz pour fournir une poussée supérieure pour une consommation de carburant donnée. Dans cette optique, la marge de manoeuvre sur la chambre de combustion est faible, à partir du moment où l'ensemble du carburant injecté est brûlé.

Néanmoins les conditions dans lesquelles se déroule le processus d'oxydation du carburant dans le foyer influencent directement la formation d'espèces chimiques nocives pour la santé et l'environnement. Parmi ces émissions polluantes nocives, on peut citer les oxydes d'azote, communément regroupés sous le terme NO_x , le monoxyde de carbone CO , les

hydrocarbures imbrûlés *UHC*, les suies qui sont des chaînes de composés carbonés agglomérés, les particules métalliques, les sulfates, les nitrates, les radicaux chimiques... Les modes de combustion présents dans le foyer favorisent la formation de certaines espèces chimiques. Les zones de flamme à haute température émettent des NO_x en plus grande quantité. La combustion pauvre, qui permet de limiter la température de flamme, conduit à l'augmentation de l'émission de CO et d'*UHC*. La qualité du carburant employé, notamment sa teneur en soufre, en métalloïdes ou en composés aromatiques, conditionne l'émission de sulfates, nitrates, de radicaux chimiques et des suies. L'interaction de la flamme et des parois de la chambre conditionne les émissions de particules métalliques... Toutes ces émissions polluantes doivent maintenant satisfaire à des normes environnementales. Chaque type de polluants est produit dans des conditions particulières parfois opposées d'un type de polluant à un autre. Pour parvenir à une solution technologique optimale, les motoristes doivent connaître, prévoir et localiser les processus chimiques et dynamiques se déroulant à l'intérieur des chambres de combustion. La simulation numérique joue un rôle essentiel dans ces différentes étapes de conception et d'optimisation de l'étage de combustion.

Le CERFACS développe depuis plus de 15 ans, le code AVBP qui est dédié à l'étude des écoulements réactifs dans des géométries complexes. Ce code de calcul est utilisé dans certaines phases d'étude de nouvelles chambres de combustion. Il apporte une compréhension des phénomènes instationnaires et de stabilisation des flammes dans les foyers.

Les phénomènes instationnaires comme l'allumage et l'extinction ainsi que les phénomènes de stabilisation d'une flamme dans un brûleur sont fortement dépendants des mécanismes de mélange entre l'air et le carburant. De même, différents modes de combustion peuvent s'établir en différents points de la chambre de combustion selon la qualité du mélange air/carburant. Les mécanismes de mélange sont complètement modifiés si le carburant est injecté sous forme liquide dans la chambre de combustion. Ainsi la prise en compte des aspects diphasiques, comme l'injection de carburant, la dispersion du brouillard de kérosène et l'évaporation, est essentielle pour analyser finement les modes de combustion dans un foyer.

1.2 Simulation numérique des écoulements diphasiques

1.2.1 Etat de l'art

Les écoulements diphasiques apparaissent dans de nombreux phénomènes physiques naturels (nuages, brouillards, écoulement à surface libre des cours d'eau, écumes des vagues, sédimentation de particules...) et sont également présents dans de nombreuses applications industrielles (transport de poudres par lits fluidisés, forages pétroliers, réacteurs chimiques, échangeurs thermiques, moteurs automobiles...). Leur omniprésence dans des domaines physiques très variés a favorisé un développement important des méthodes numériques pour la simulation des écoulements diphasiques. Elles peuvent être hiérarchisées en fonction des problèmes qu'elles permettent de simuler.

La résolution exacte d'un système diphasique consiste à résoudre au cours du temps les équations de Navier-Stokes et/ou des milieux continus et de *coupler* les problèmes par des relations de saut aux interfaces entre les deux fluides pour prendre en compte les échanges de masse, de quantité de mouvement et d'énergie entre les phases. Une telle méthode nécessite des méthodes numériques adaptées (Menard *et al.*, 2007; Desjardins *et al.*, 2008b; Dupont & Legendre, 2009; Legendre *et al.*, 2009) et une résolution spatiale suffisante pour résoudre la position des interfaces. Si cette méthode très coûteuse peut-être envisagée pour les problèmes dans lesquels les interfaces ont un intérêt fort (atomisation de jets liquides, écoulements à surface libre...) il n'est pas envisageable de l'appliquer à l'écoulement d'un brouillard de gouttes de carburant en suspension dans une chambre de combustion aéronautique. De plus, une telle résolution apporterait une quantité importante d'information qui n'est certainement pas nécessaire pour la compréhension de l'écoulement global. En effet, la connaissance de propriétés moyennes de la phase dispersée comme la distribution de masse, la vitesse et la température moyennes des particules sur un volume réduit sont souvent largement suffisantes. Ainsi des méthodes adaptées aux écoulements dispersés ont été développées spécifiquement dans le but d'obtenir des quantités représentatives du brouillard de manière efficace. Mashayek & Pandya (2003) font une revue détaillée des différentes descriptions employées pour la simulation des écoulements turbulents chargés en particules ou en gouttelettes. Les méthodes adaptées aux écoulements dispersés se distinguent en deux groupes : les méthodes Lagrangiennes et les méthodes Eulériennes. Ces méthodes résolvent séparément l'écoulement turbulent pour la phase porteuse et la dynamique du brouillard de gouttes. Elles considèrent les gouttes comme des particules sphériques indéformables dont le rayon, la température, la vitesse et la concentration peuvent évoluer en fonction des efforts et des échanges avec la phase porteuse.

Utiliser une méthode adaptée aux écoulements dispersés pour résoudre la dynamique et la thermique du carburant liquide injecté dans un foyer aéronautique revient à supposer que le processus d'atomisation primaire est achevé. Dans les zones proches des injecteurs cette hypothèse forte est à reconsidérer et une modélisation particulière est à prendre à compte. Plus loin dans l'écoulement, l'hypothèse de sphéricité des gouttes est raisonnable. Une goutte sphérique reste n'est pas déformée tant que les effets de tension superficielle restent prédominants devant les effets d'inertie :

$$\frac{\sigma}{d} \gg \rho \mathbf{u}_l - \mathbf{u}^2 \quad (1.1)$$

c'est-à-dire un nombre de Weber We très petit :

$$We = \frac{\rho \mathbf{u}_l - \mathbf{u}^2 d}{\sigma} \ll 1 \quad (1.2)$$

Pour une goutte de kérosène, en prenant une goutte de diamètre caractéristique d de 100 microns et un coefficient de tension de surface σ de 26 mN/m dans l'air à température ambiante (densité : $\rho = 1.2 \text{ kg/m}^3$, viscosité : $\mu = 1.8 \times 10^{-5} \text{ kg/m/s}$), les effets d'inertie ne déforment pas la goutte tant que la vitesse relative de la goutte dans l'écoulement gazeux est plus petite que 15 m/s, c'est-à-dire que le nombre de Reynolds particulaire Eq. (1.3) est plus petit que 100.

$$Re_p = \frac{\rho \mathbf{u}_l - \mathbf{u} d}{\mu} \quad (1.3)$$

Dans les applications considérées, le nombre de Reynolds particulière est de l'ordre de quelques centaines. Ainsi l'hypothèse de goutte sphérique semble relativement bien justifiée puisque les gouttes de carburant une fois formées sont sphériques et ne sont pas déformées par l'écoulement. La résolution de l'interface air/liquide n'a pas un grand intérêt pour étudier la dynamique du spray, à condition de s'assurer que la phase d'atomisation est terminée.

Les méthodes Lagrangiennes consistent, de manière générale, à résoudre les équations de la mécanique du point pour les particules soumises aux forces exercées par le fluide porteur et à suivre la trajectoire de chaque particule dans le domaine de calcul. Les particules suivies dans la simulation peuvent correspondre à des particules *réelles* ou des ensembles¹ de particules *réelles* initialement proches. Dans ce cas là, la méthode Lagrangienne est dite *déterministe*. Il s'agit alors d'évaluer les efforts du gaz à l'endroit de la particule, ce qui n'est pas forcément simple. Si la méthode de suivi Lagrangien est couplée avec une méthode de simulation numérique directe², les propriétés à l'endroit de la goutte sont évaluées par une interpolation qui doit être précise. De telles simulations sont très utilisées car elles permettent d'analyser des comportements statistiques des gouttes, de leur dynamique, dispersion, évaporation ou réaction chimique dans un écoulement turbulent simple comme une turbulence homogène isotrope (Squires & Eaton, 1991; Elghobashi & Truesdell, 1992; Mashayek *et al.*, 1997; Boivin *et al.*, 1998; Réveillon *et al.*, 2004), ou une turbulence cisailée (Mashayek, 2000; Okong'o & Bellan, 2000; Vermorel *et al.*, 2003; Réveillon & Vervisch, 2005; Vance *et al.*, 2006). Lorsque la méthode de suivi particulière est couplée à une simulation numérique employant un certain niveau de modélisation de l'effet de la turbulence, comme la simulation aux grandes échelles LES ou les simulations RANS, l'évaluation des efforts du gaz sur les particules n'est alors plus directe. Dans les simulations RANS³, les équations de Reynolds sont résolues pour déterminer le champ de vitesse moyenne *au sens statistique*, dans les simulations LES⁴, les équations de Navier-Stokes filtrées sont résolues pour déterminer le champ résolu de vitesse associé aux mouvements des plus grandes structures de la turbulence. Dans ces approches, les grandeurs du fluide porteur interpolées à l'endroit de la particule ne correspondent pas aux grandeurs *vues* par la particule puisque la présence de la goutte dévie localement l'écoulement porteur. Il s'agit alors de reconstruire à partir des statistiques de la turbulence locale une turbulence synthétique à l'endroit de la particule. La méthode n'est alors plus à proprement parlé déterministe. Dans la plupart des calculs réalisés en LES, les effets des fluctuations dus aux plus petites échelles sur les particules sont négligés (Wang & Squires, 1996; Boivin *et al.*, 2000; Sankaran & Menon, 2002; Apte *et al.*, 2003; Patel & Menon, 2008). En tenant compte des interactions directes-inverses⁵ entre les particules et le fluide porteur, les particules et leur sillage peuvent éventuellement influencer la modélisation de la turbulence, c'est-à-dire le modèle de sous-maille en LES (Yuu *et al.*, 2001; Pandya & Mashayek, 2002) ou les équations de transport des grandeurs statistiques de la turbulence

¹En anglais, on parle de *parcel* pour dénommer les particules numériques représentant une dizaine de particules identiques.

²L'écoulement turbulent du fluide porteur est obtenu par la résolution complète des équations de Navier-Stokes sans modélisation de la turbulence. L'ensemble des échelles de la turbulence doivent alors être résolues sur la grille de calcul.

³pour *Reynolds-averaged Navier-Stokes* en anglais.

⁴pour *Large-Eddy Simulations* en anglais.

⁵ou *two-way coupling* en anglais.

en RANS (Elghobashi & Abou-Arab, 1983; Elghobashi *et al.*, 1984; Rizk & Elghobashi, 1989). Les méthodes Lagrangiennes *stochastiques* s'attachent à suivre non pas les particules réelles de l'écoulement mais un grand nombre de particules *fictives* ou *stochastiques*. La difficulté ne réside plus dans la détermination des efforts du fluide sur la particule mais plutôt dans le processus de génération d'un échantillon aléatoire de particules (Gosman & Ioannides, 1981; Jones & Sheen, 1999; Fede *et al.*, 2002). Ces approches conduisent à la résolution d'une équation d'évolution d'une fonction de probabilité de présence des gouttes sur le domaine par une méthode de *Monte-Carlo*.

Les méthodes Eulériennes *a contrario* ne cherchent pas à déterminer les propriétés de chaque particule mais à obtenir des propriétés locales caractéristiques du spray. Une première stratégie consiste à supposer que la dynamique de la phase liquide dispersée peut être estimée par celle de la phase porteuse. Ainsi un développement limité autour de la vitesse du gaz est réalisé pour obtenir la vitesse d'équilibre de la phase liquide dispersée (Ferry & Balachandar, 2002; Ferry *et al.*, 2003). Cette méthode est appelée *fast Eulerian method* en anglais pour méthode Eulérienne rapide (Ferry & Balachandar, 2001). En effet dans cette méthode, il n'y a pas d'équation de transport pour la vitesse de la phase dispersée. Des équations de transport sont tout de même nécessaires pour résoudre, par exemple, la répartition du volume de liquide dans le domaine, mais elles sont alors linéaires puisque la vitesse est déjà déterminée. Une seconde stratégie consiste à écrire un système d'équations de transport pour les propriétés moyennes de la phase dispersée en appliquant un filtrage volumique ou statistique sur l'ensemble des particules (Zhang & Prosperetti, 1994; Jackson, 1997). On parle alors de méthodes à *deux fluides* (Druzhinin & Elghobashi, 1998; Sirignano, 1999) puisque les deux phases sont considérées comme des *continua*. Pour ce type de méthodes, il reste à établir des modèles de fermeture pour les termes croisés dus à l'opérateur de moyenne. Ces termes font intervenir des contributions de la cinématique non résolue de la phase dispersée et de la turbulence de la phase porteuse difficiles à modéliser de manière univoque. Afin de pouvoir distinguer les effets du fluide porteur sur la phase dispersée et inversement, Février *et al.* (2005) proposent d'introduire une fonction densité de probabilité de la phase particulaire conditionnée par une réalisation du fluide porteur. Le *formalisme Euler-Euler mésoscopique* consiste alors à appliquer un opérateur de moyenne sur l'ensemble des réalisations particulières conditionnées par une réalisation de la phase porteuse. Les propriétés caractéristiques de la phase dispersée sont alors obtenues en résolvant l'équation d'évolution de type Boltzmann de cette fonction de probabilité, notée *pdf* pour *probability density function* en anglais. A nouveau, plusieurs stratégies apparaissent dans la littérature. Les méthodes aux moments résolvent des équations de transport pour les premiers moments de la *pdf*. Cette stratégie peut être associée à la simulation directe (Kaufmann *et al.*, 2008), la simulation aux grandes échelles (Boileau *et al.*, 2008a; Riber *et al.*, 2009) ou aux méthodes RANS (Saulnier *et al.*, 2005; Gevrin *et al.*, 2008). Les méthodes de quadrature des moments consistent à représenter la *pdf* par une série de Diracs et à résoudre une équation de transport pour chaque Dirac (Desjardins *et al.*, 2008a). Enfin l'équation d'évolution de la *pdf* peut être résolue en discrétisant l'espace des phases. Dans la méthode *multi-fluide* (ou méthode *sectionnelle*), par exemple, l'espace des diamètres est discrétisé et une méthode aux moments ou de quadrature des moments est utilisée pour résoudre la dynamique pour chaque section (Greenberg *et al.*, 1993; Laurent *et al.*, 2004; Fox *et al.*, 2008; De Chaisemartin, 2009).

1.2.2 Choix des méthodes de résolution pour ce travail de thèse

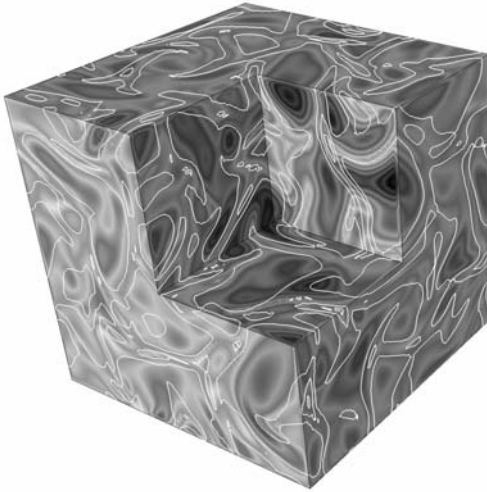
Les différentes approches Lagrangienne et Eulerienne ont chacune leurs avantages et inconvénients qui ont longtemps été débattus dans la communauté scientifique. Elles n'apportent certainement pas le même niveau de compréhension et de précision de la dynamique du spray. Les approches Lagrangiennes requièrent des structures de données très différentes, qui ne sont pas faciles à implanter, notamment dans un code parallèle et non-structuré comme AVBP. Les méthodes de quadrature des moments QMOM requièrent des algorithmes de résolution particuliers notamment pour la recherche des valeurs propres des systèmes matriciels (Laurent, 2008; Desjardins *et al.*, 2008a). Les méthodes aux moments et les méthodes à *deux-fluides* conduisent à un système d'équations de transport des variables de la phase liquide dispersée qui ressemble beaucoup au système d'équations pour la phase porteuse. Ainsi elles sont plus faciles à intégrer dans un code déjà évolué comme AVBP, puisque l'extension aux écoulements diphasiques consiste principalement à rajouter un vecteur d'inconnues et le calcul des termes de couplage. Cette extension a débuté dans AVBP il y a 8 ans grâce aux travaux de Kaufmann (2004). Le choix s'est porté sur la méthode aux moments Euler-Euler *mésoscopique* (Simonin, 1996; Février *et al.*, 2005) pour laquelle les termes de fermeture sont étudiés et modélisés dans le groupe E2C de l'IMFT. L'approche a ensuite été étendue à la simulation LES par Moreau (2006) et Riber (2007). L'approche Euler-Euler a été rajoutée en 2006 à la version officielle V6.0 d'AVBP. Le solveur a démontré ses performances grâce à des calculs démonstratifs et de validation (Boileau *et al.*, 2008a,b). Récemment le développement d'un solveur Lagrangien a fait l'objet des travaux de thèse de García (2009). Les solveurs Lagrangien et Eulérien d'AVBP ont alors fait l'objet d'études comparatives et de premières validations sur un *cas test académique*, cf. §-1.3.2.

1.3 Validation et vérification des codes numériques

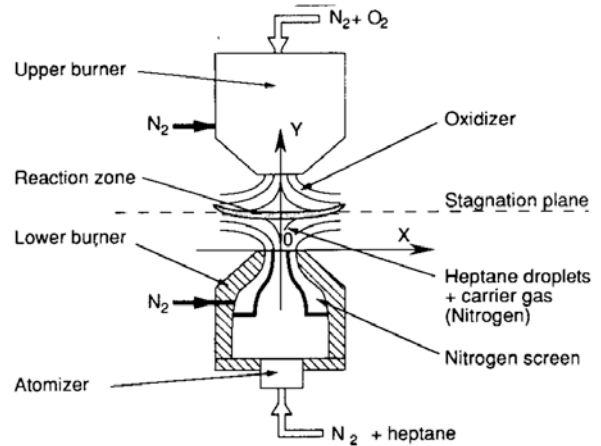
Avant que les motoristes puissent utiliser une simulation numérique pour obtenir des informations sur un système particulier, il faut s'assurer de la fiabilité de l'outil numérique employé. Pour cela on a recours à ce l'on appelle la V&V, pour *Vérification* et *Validation* (Roache, 1990, 1998). La *Vérification* consiste à s'assurer que le système d'équations différentielles est mathématiquement bien résolu, et d'en mesurer la précision. La *Validation* consiste à évaluer la précision des modèles employés sur des configurations réelles. Il s'agit de vérifier que le code numérique résout la bonne physique des problèmes sur lesquels il est déployé, et de mesurer la précision des simulations et donc l'indice de confiance que l'on peut avoir dans les résultats fournis. L'*American Institute of Aeronautics and Astronautics* (Oberkampf *et al.*, 1997) recommande que le travail de *Validation* soit fait par augmentation progressive de la complexité des problèmes de validations du plus simple vers le problème industriel global. Pour l'étude de la combustion dans un foyer aéronautique, le problème de l'écoulement diphasique réactif dans une turbine à gaz industrielle peut être validé sur une suite de problèmes de plus en plus complexes. On peut distinguer trois types de problèmes pour la *Validation*.

1.3.1 Les problèmes canoniques

Il s'agit de l'étude, dans une géométrie la plus simple possible, d'un écoulement dans lequel les mécanismes physiques d'intérêt sont découplés et isolés. Pour la validation des modèles de turbulence, les cas tests les plus utilisés sont la décroissance de la turbulence homogène isotrope (THI)⁶ (Fig. 1.1(a)) et l'écoulement dans un canal plan. Pour la validation des modèles de combustion, l'étude de flamme laminaire monodimensionnelle de pré-mélange ou de flamme à contre-courant⁷ (Fig. 1.1(b)) sont des problèmes canoniques très employés. Le cas d'évaporation de gouttes dans une atmosphère gazeuse au repos est également un problème canonique permettant de valider les modèles d'évaporation. Sur ce type de problème simple, les résultats de simulation numérique sont comparés à des mesures expérimentales ou à des solutions analytiques. Ces configurations permettent de valider des modèles physiques en isolant le phénomène modélisé des autres effets.



(a) Extrait de (Boileau, 2007) : Vue d'un cas de THI décroissante chargée en gouttelettes évaporantes. Les dégradés gris représentent le champ de vorticit , les iso-lignes blanches repr sentent les zones de concentration pr f rentielle de gouttes.



(b) Extrait de (Darabiha *et al.*, 1993) : Montage exp rimental d'une flamme diphasique   contre-courant. En haut un  coulement d'air, en bas un  coulement de diazote charg  en gouttelettes de carburant. Au centre une flamme   contre-courant se stabilise en fonction des conditions op ratoires.

FIG. 1.1: *Exemples de probl mes canoniques.*

⁶Ce cas test num rique repr sente dans l'espace temporel, la d croissance spatiale d'une turbulence form e en aval d'une grille fine.

⁷La flamme   contre-courant est une flamme de diffusion  tir e et stabilis e.

1.3.2 Les cas tests académiques

Ce sont des configurations dont la géométrie est simplifiée mais qui présentent des mécanismes clés que l'on retrouve dans le problème industriel global. Ces configurations sont très souvent réalisées et placées sur des bancs expérimentaux où un grand nombre de mesures expérimentales sont effectuées afin de caractériser au mieux l'écoulement simplifié. Pour les écoulements diphasiques, les cas tests de validation sont des écoulements turbulents chargés en particules (Hishida *et al.*, 1985; Sommerfeld & Qiu, 1993; Borée *et al.*, 2001). Pour la combustion, il existe de nombreux brûleurs de laboratoire avec des mesures bien documentées à l'ONERA, à l'EM2C, au DLR, à Sandia... Des exemples de flammes non-prémélangées sont présentés Fig. 1.2.

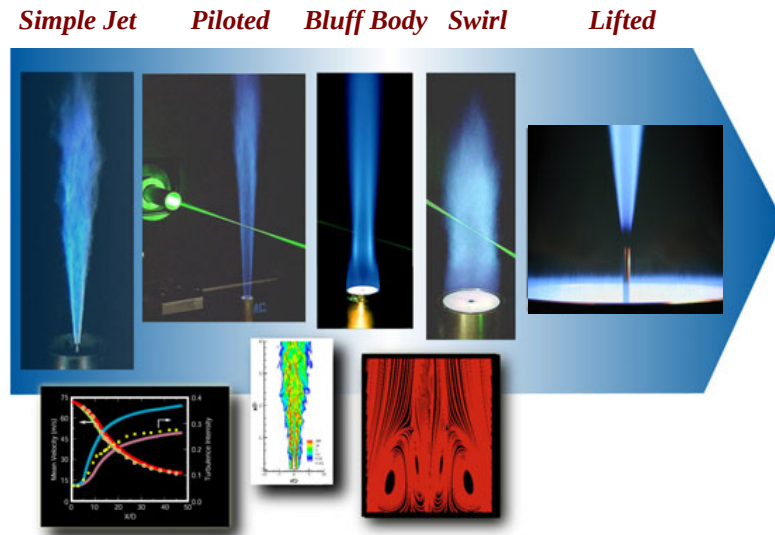


FIG. 1.2: Extrait de Barlow (2006) : exemples de brûleurs de laboratoire pour l'étude de la combustion non-prémélangée.

Les cas tests académiques permettent d'évaluer précisément les capacités des codes numériques sur des configurations caractéristiques de certains aspects physiques du problème industriel global. Les approches Euler-Lagrange et Euler-Euler ont, par exemple, fait l'objet d'études comparatives sur la configuration *Hercule* (Borée *et al.*, 2001). Ce travail a constitué une première étape de validation d'AVBP pour la simulation d'écoulements dispersés (Riber *et al.*, 2009). Sur la Fig. 1.3, les résultats obtenus par Riber (2007) avec l'approche Euler-Euler *mésoscopique* pour la simulation aux grandes échelles sur cette configuration sont reproduits. Il s'agit d'un écoulement recirculant (dû à la présence de l'obstacle⁸ au centre de l'écoulement) chargé en particules de verre. Cette configuration a permis d'évaluer la méthode Euler-Euler *mésoscopique* pour simuler la dispersion de particules dans un écoulement turbulent assez représentatif des écoulements dans les chambres de combustion, dans lesquelles le confinement génère de larges zones de recirculation. L'utilisation de particules de verre permet d'annuler dans l'expérience les effets thermiques et d'évaporation qui pourraient apparaître avec un brouillard de gouttelettes. Cela permet

⁸On parle de *bluffbody* en anglais.

également de sélectionner la taille et la distribution des particules injectées, et ainsi de définir précisément les conditions limites des simulations numériques (Riber *et al.*, 2009). La comparaison des méthodes Lagrangienne et Eulérienne sur le même cas test permet d'attester la fiabilité des deux approches pour la simulation de la dispersion turbulente de particules. L'étude a permis de quantifier la précision des résultats numériques sur la statistique des phases gazeuse et dispersée.

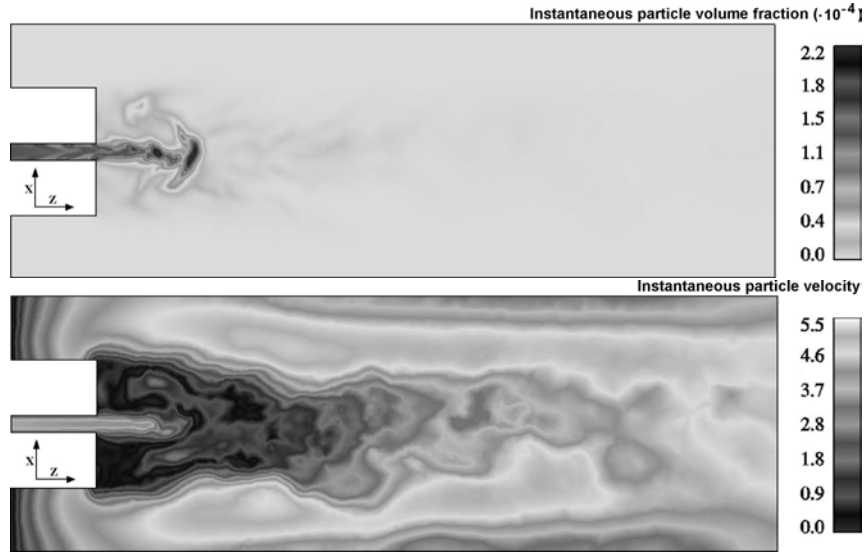
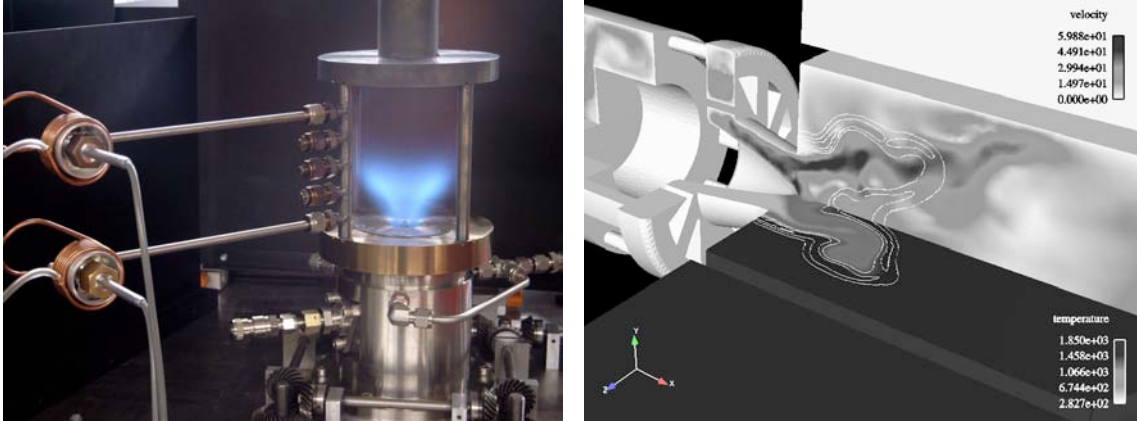


FIG. 1.3: Extraits de la thèse de Riber (2007) : Résultats obtenus avec l'approche Euler-Euler mésoscopique sur la configuration Hercule. Champs instantanés de fraction volumique (haut) et de vitesse de la phase dispersée (bas).

1.3.3 Les sous-systèmes du problème industriel global

Ces cas représentent une simplification géométrique et une limitation de la complexité physique du problème industriel global. Il peut s'agir de l'étude expérimentale d'un nombre réduit d'injecteurs, ou de l'étude d'un système avec un carburant différent, ou encore de l'étude d'un écoulement à des conditions opératoires reproductibles en laboratoire. En combustion gazeuse pré-mélangée et partiellement pré-mélangée, le banc d'essai PRECCINSTA (Weigand *et al.*, 2006; Meier *et al.*, 2006) est une configuration de flamme swirlée qui présente des instabilités de combustion. Les expérimentateurs ont collecté un nombre conséquent de mesures optiques sur l'écoulement et la flamme. Le système d'injection est un modèle d'essai fourni par TURBOMECA, la géométrie de la chambre est très simplifiée et le carburant injecté est gazeux. Néanmoins cette configuration permet de reproduire des instabilités de combustion qui sont des phénomènes critiques dans les foyers réels. Cette configuration représente un excellent cas de validation pour les codes numériques dédiés aux écoulements instationnaires réactifs en géométrie complexe et sert de configuration test au CERFACS pour la prédiction des instabilités de combustion et l'étude des modèles de combustion turbulente et de cinétique chimique (Roux *et al.*, 2005; Albouze, 2009; Franzelli, 2010).



(a) Visualisation du montage expérimental du banc d'essai PRECCINSTA. (b) Visualisation du front de flamme obtenu par simulation LES avec AVBP (Roux *et al.*, 2005).

FIG. 1.4: Banc d'essai PRECCINSTA monté au DLR, Allemagne.

1.4 Objectifs de cette thèse

L'étape de validation d'un code numérique est une étape essentielle afin de quantifier le niveau de confiance que l'on peut associer au résultat d'une simulation numérique. L'objectif de cette thèse s'inscrit dans la suite logique des travaux de validation de l'approche Euler-Euler *mésoscopique* implantée dans AVBP. Cette méthode étendue à la simulation aux grandes échelles est décrite dans la première partie de ce manuscrit. Elle résout des équations continues pour les phases gazeuse et dispersée. Les grandeurs transportées caractérisant le spray de gouttes sont des moyennes statistiques dites *mésoscopiques* conditionnées par une (ou plusieurs) réalisation(s) de la phase gazeuse correspondant à l'écoulement gazeux résolu. Dans le travail présenté ici, il s'agit d'augmenter la complexité du problème de validation de la méthode pour la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique dans les foyers aéronautiques.

1.4.1 Point de départ du travail de validation

La simulation de la dispersion de gouttes et du mélange du carburant évaporé dans un écoulement turbulent avec l'approche Euler-Euler d'AVBP a fait l'objet de validations qui peuvent être classées par ordre de complexité croissante :

- Des simulations numériques directes d'une décroissance de THI chargée en particules ont été réalisées. Les résultats de l'approche Euler-Euler *mésoscopique* ont été comparés aux résultats d'une simulation Lagrangienne. Kaufmann *et al.* (2008) montrent que l'approche Eulerienne fournit des corrélations de vitesse gaz-particules et des statistiques sur les énergies corrélée et décorrélée du mouvement d'ensemble⁹

⁹Ces notions de mouvement d'ensemble et de mouvement décorrélé des particules seront définies au

pour les particules en très bon accord avec l'approche Lagrangienne. Cependant, ce cas test a mis en évidence les difficultés numériques de la méthode Euler-Euler liées aux forts effets de compressibilité de la phase dispersée : les particules ne restent pas réparties de manière dans le domaine mais se concentrent dans les zones de faible vorticit  de l' coulement.

- La simulation num rique directe d'une THI charg e en gouttelettes  vaporantes r alis e par Boileau (2007) a permis de retrouver les comportements observ s dans les simulations Lagrangiennes d' vaporation (Okong'o & Bellan, 2000; R veillon & Demoulin, 2007) avec l'approche Euler-Euler *m soscopique* implant e dans AVBP. Les gouttes se concentrent dans les zones de faible vorticit , il s'agit du ph nom ne de *concentration pr f rentielle*. Le champ de carburant r sulte alors de la comp tition des termes source d' vaporation localis s aux endroits de forte densit  de gouttes et des effets de diffusion turbulente qui favorisent le m lange.
- Riber (2007) a r alis  une simulation Euler-Euler d'un jet vertical charg  en particules (Hishida *et al.*, 1987). Cette configuration pleinement turbulente, a permis de valider l'utilisation du mod le de sous-maille pour la phase dispers e. En revanche, dans ce type d' coulement cisail  de trop forts niveaux d' nergie d corr l e tr s localis s apparaissent et d stabilisent le calcul. Les calculs n gligeant le mouvement d corr l  des particules ont tout de m me fourni des r sultats en bon accord avec les mesures exp rimentales.
- Les simulations diphasiques de l' coulement vrill  de l'exp rience de Sommerfeld & Qiu (1991) et de l' coulement recirculant du banc exp rimental *Hercule* (Bor e *et al.*, 2001) ont montr  la capacit  de la m thode Euler-Euler   reproduire la cin matique des  coulements caract ristiques des chambres de combustion. A nouveau les calculs r alis s n gligent le mouvement d corr l  des particules, et les r sultats montrent quelques impr cisions sur les niveaux moyens des fluctuations de la phase dispers e.

1.4.2 Choix de la configuration cible

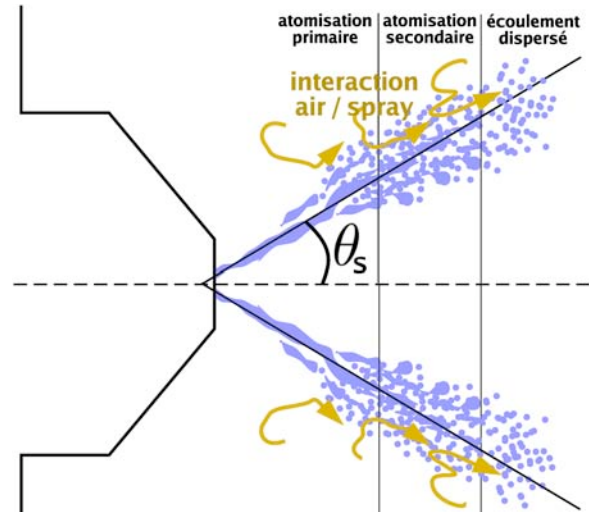
Ainsi l'approche Euler-Euler *m soscopique* a  t  mise en oeuvre sur des probl mes canoniques (cf.  -1.3.1) et des cas tests acad miques (cf.  -1.3.2). Dans ce travail de th se, la configuration retenue pour l' tape suivante de validation du code de calcul AVBP, est celle du banc d'essai MERCATO. Cette configuration peut  tre consid r e comme un sous-syst me d'une chambre de combustion a ronautique d di    l' tude des  coulements diphasiques. La pr sentation de la configuration MERCATO, des simulations r alis es et l'analyse des r sultats fait l'objet de la Partie de ce manuscrit.

Le banc d'essai MERCATO, install  au centre du Fauga-Mauzac de l'ONERA, est tr s similaire au banc exp rimental PRECCINSTA, pr sent  au  -1.3.3. Le syst me d'injection

d'air est un tourbillonneur similaire à celui monté sur le banc PRECCINSTA. Au bout du nez de l'injecteur, un gicleur de kérosène liquide est ajouté. Il s'agit d'un atomiseur pressurisé-swirlé caractéristique des atomiseurs employés dans les foyers aéronautiques. Ce banc expérimental est équipé d'un grand nombre d'accès visuels pour réaliser des mesures par technique laser. Ce banc est dédié à des conditions de fonctionnement d'allumage ou de rallumage : basse pression et basse température. De nombreux points de fonctionnement ont été étudiés (García-Rosa, 2008; Lecourt, 2008a,b) et constituent une base de données pour la validation des codes numériques, dédiée à l'allumage et la stabilisation du noyau d'allumage. Dans ce travail de thèse, seul le point de fonctionnement dit de *mise en place* (García-Rosa, 2008) est considéré. Il s'agit du point le plus favorable¹⁰ aux mesures optiques : l'écoulement est *non-réactif*, l'air injecté est préchauffé au delà de la température normale d'ébullition¹¹ du kérosène, les débits de liquide sont faibles de sorte que l'évaporation du carburant est favorisée. Ce point de fonctionnement a permis aux expérimentateurs de mettre en place et de calibrer leurs dispositifs de mesure.



(a) Photographie du liquide à la sortie de l'atomiseur. Source : <http://www.delavaninc.com>



(b) Mise en évidence des mécanismes de formation du brouillard de gouttelettes.

FIG. 1.5: Atomisation par un injecteur pressurisé-swirlé.

L'atomiseur produit un spray de gouttes de kérosène qui se dispersent et s'évaporent dans l'écoulement d'air préchauffé vrillé et fortement turbulent. Cette configuration s'inscrit donc dans la suite logique du travail de validation réalisé, présenté au paragraphe précédent §-1.4.1. Les phénomènes d'agitation turbulente, de dispersion et d'évaporation de gouttes, et de mélange du carburant dans l'air se retrouvent fortement couplés dans une configuration complexe : l'écoulement en sortie du système d'injection est vrillé, fortement turbulent et recirculant. Au-delà de la complexité de l'écoulement gazeux, le système d'injection ajoute une difficulté supplémentaire à traiter dans les simulations. Un atomiseur pressurisé-swirlé produit un spray dit en *cône creux*. Comme cela est illustré sur la Fig. 1.5,

¹⁰Les hublots de visualisation restent propres plus longtemps.

¹¹Dans la littérature, on appelle communément température normale d'ébullition la température de vaporisation du liquide à pression atmosphérique.

le liquide éjecté de l'orifice est d'abord sous la forme d'un film conique fin qui est ensuite déstabilisé par interaction avec l'écoulement gazeux. Le spray n'est dispersé qu'à l'issue des processus d'atomisation primaire et secondaire. Ainsi le brouillard formé n'apparaît pas instantanément dès la sortie du liquide de l'injecteur et sa caractérisation ne pourra pas être aussi précise que pouvaient l'être les particules de verre injectées dans les cas tests académiques utilisés dans les configurations présentées précédemment, au §-1.4.1. La définition des conditions limites d'injection adaptées aux approches sans description de l'interface gaz/liquide fera l'objet d'un travail spécifique dans ce manuscrit présenté au Chapitre 7.

La seconde difficulté associée à cette configuration est l'utilisation de *kérosène* dans les campagnes expérimentales. Le kérosène est le carburant employé dans l'aviation car son fort pouvoir énergétique de plus de 40 MJ/kg permet une grande autonomie de vol. Son point de gel, autour de -50°C , est relativement bas, comparé à d'autres carburants liquides. Ainsi il peut être utilisé pour les vols à haute altitude. Le kérosène n'est pas un composé pur bien défini, mais correspond à un mélange complexe d'hydrocarbures à longue chaîne, ramifiés ou aromatiques, et d'additifs. Le mélange varie selon l'origine de l'approvisionnement du pétrole brut et selon les réglementations des pays (Coordinating Research Council, 2004). Afin de pouvoir simuler l'écoulement diphasique évaporant du banc d'essai MERCATO, la première tâche consiste à définir un modèle chimique pour représenter le kérosène. Le composé ou espèce chimique modèle construit, ou *surrogate* en anglais, doit avoir les mêmes propriétés que le *kérosène* employé dans les expériences et notamment son pouvoir énergétique. La validation du modèle d'évaporation et des propriétés thermodynamiques et de transport du *surrogate* retenus dans AVBP est présentée au Chapitre 6 de ce manuscrit.

Enfin, lors des campagnes expérimentales, l'écoulement diphasique sur le banc d'essai MERCATO a exhibé des mécanismes instationnaires. Sur la Fig. 1.6, quatre clichés matérialisant les contours des zones les plus denses de l'écoulement permettent de distinguer un phénomène fortement instationnaire. Ces clichés sont obtenus en illuminant l'écoulement diphasique selon un plan laser perpendiculaire à la direction d'observation. Les contours délimitent les zones dont l'intensité est supérieure à 70% de l'intensité maximale de la photographie réalisée. Le jet de gouttes bat autour de sa position moyenne. Des paquets de gouttes en forme de croissant semblent être arrachés périodiquement par l'écoulement.

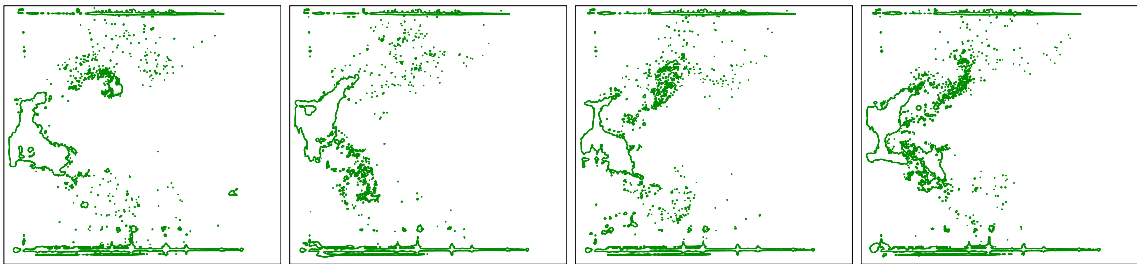


FIG. 1.6: Images extraites de la thèse de García-Rosa (2008), montrant plusieurs visualisation du brouillard par tomographie laser à basse cadence (10 Hz).

L'utilisation de la simulation aux grandes échelles permet de capter les phénomènes instationnaires hydrodynamiques ou acoustiques¹². Les résultats de la simulation diphasique ont permis d'identifier et d'analyser les structures instationnaires des écoulements gazeux et dispersé. Ce travail est présenté au Chapitre 9.

1.4.3 Stratégies numériques

Comme cela a été mis en évidence par les précédents travaux résumés au §-1.4.1, l'approche Euler-Euler implantée dans AVBP souffre de difficultés numériques. En effet, la phase dispersée est une phase fortement compressible qui présente des gradients forts. Les équations de transport de la méthode aux moments, qui sont présentées au Chapitre 3, ne contiennent pas de terme de diffusion, et la non-linéarité des équations peut faire apparaître des zones de chocs (De Chaisemartin, 2009). Si un schéma centré est adapté à la simulation aux grandes échelles des écoulements gazeux car il apporte des résultats précis en temps et en espace, il n'est pas forcément adapté à la résolution des équations de la phase liquide.

Les méthodes numériques employées dans ces travaux de thèse sont décrites et analysées sur des cas tests monodimensionnels dans la Partie de ce manuscrit. Actuellement plusieurs stratégies numériques sont développées dans AVBP afin d'augmenter la robustesse et la précision de la méthode Euler-Euler. La première stratégie consiste à utiliser des schémas convectifs centrés peu dispersifs et de les stabiliser en ajoutant localement de la diffusion artificielle (Riber, 2007). Pour stabiliser l'équation de l'énergie décorrélée, Martinez (2009) préconise l'utilisation d'une discrétisation adaptée pour les termes sources de cette équation et l'application d'un limiteur de valeurs. La seconde stratégie numérique consiste à utiliser un schéma décentré amont dédié à la résolution des équations de la phase liquide (Roux, 2009). Ce type de schéma dissipatif n'est habituellement pas apprécié en LES du fait de sa faible précision temporelle. Ces deux types de stratégies sont mises en oeuvre sur la configuration MERCATO, les résultats des méthodes respectives sont confrontées au Chapitre 10. Il s'agit d'identifier la méthode la plus adaptée pour permettre l'utilisation de l'approche Euler-Euler d'AVBP sur une configuration industrielle réelle.

Enfin grâce à l'implantation récente du suivi de particules dans AVBP (García, 2009), Senoner (2010) a reproduit les simulations de la configuration MERCATO avec la méthode Euler-Lagrange. Il est alors possible d'évaluer les performances des approches Euler-Euler et Euler-Lagrange en utilisant le même solveur gazeux, le même maillage et les mêmes modèles physiques présentés dans les Parties et . L'analyse des résultats et la comparaison avec les mesures expérimentales permet d'attester la cohérence entre les deux méthodes utilisant des opérateurs statistiques différents. Cette comparaison permet également de quantifier les performances associées à chaque approche. Ce travail est présenté au Chapitre 10.

¹²On rappelle que les équations de la phase gazeuse résolues sont compressibles.

1.5 Organisation du manuscrit

La première partie s'attache à présenter les systèmes d'équations de l'approche Euler-Euler *mésoscopique* pour la simulation aux grandes échelles des écoulements turbulents diphasiques. La description des modèles de fermeture s'intéresse exclusivement aux modèles utilisés dans cette thèse. Le Chapitre 2 présente les équations de conservation de la phase gazeuse ainsi que les équations filtrées qui sont résolues dans le code AVBP. Le Chapitre 3 rappelle les points clés de la dérivation des équations au moments pour la phase dispersée dans l'approche Euler-Euler *mésoscopique*. Les modèles de fermeture liés au mouvement décorrélié et les modèles de couplage entre les phases sont précisément décrits. Les équations filtrées résolues dans les simulations et le modèle de sous-maille employé sont également données.

La seconde partie traite des aspects numériques des simulations diphasiques. Le Chapitre 4 décrit l'ensemble des méthodes numériques qui sont employées dans les calculs réalisés au cours de ces travaux de thèse. L'étude présentée au Chapitre 5 identifie sur des cas tests monodimensionnels les difficultés numériques liées au système d'équation de la phase dispersée et présente les différentes stratégies numériques mises en oeuvre sur la configuration MERCATO.

La troisième partie est consacrée au développement de modèles physiques nécessaire pour la réalisation des simulations sur la configuration MERCATO. Le Chapitre 6 traite du choix des paramètres de thermodynamique et de transport dans le modèle d'évaporation implanté et de la modélisation du *kérosène* liquide. Le Chapitre 7 présente un modèle pour l'injection de carburant liquide dans une méthode adaptée aux écoulement dispersés. Le modèle FIM-UR développé s'attache à définir des conditions limites d'injection pour les approches Euler-Euler et Euler-Lagrange.

La dernière partie de ce manuscrit porte exclusivement sur la configuration MERCATO. Le Chapitre 8 présente le banc d'essai et les mesures obtenues lors des campagnes expérimentales réalisées par N. García-Rosa et R. Lecourt à l'ONERA Fauga-Mauzac. Les paramètres des simulations Euler-Euler réalisées avec AVBP et l'analyse physique de l'écoulement diphasique évaporant dans la chambre MERCATO font l'objet du Chapitre 9. Les résultats obtenus dans la simulation sont également comparés aux mesures expérimentales. Le Chapitre 10 évalue les performances relatives des différentes stratégies numériques envisagées dans AVBP pour le traitement de la phase dispersée. La comparaison des résultats de simulations Euler-Euler et Euler-Lagrange réalisées avec AVBP sur la configuration MERCATO atteste de la fiabilité des deux méthodes pour le traitement de la phase dispersée en géométrie complexe.

Première partie

Présentation des équations et modèles pour les écoulements turbulents diphasiques

Introduction

Introduction Au cours des vingt dernières années, la LES, acronyme anglais pour la Simulation aux Grandes Échelles, est certainement la méthode numérique qui s'est le plus développée, au rythme de l'accroissement constant des moyens de calcul. D'abord limitée à de faibles nombres de Reynolds et pour des problèmes canoniques (cf. Chapitre 1), elle est maintenant employée dans les centres de recherche pour la simulation de phénomènes instationnaires pour des écoulements turbulents fortement tridimensionnels dans des géométries complexes. Elle est également de plus en plus utilisée par les industriels dans l'analyse de situations critiques pour minimiser la prise de risques. AVBP a été employé, par exemple, pour la prévision des instabilités thermo-acoustiques (Staffelbach *et al.*, 2009) et la prévision de la répartition des fluctuations de températures en entrée de turbine (Boudier *et al.*, 2007).

Le principe de la simulation LES est d'appliquer un filtrage spatial aux équations instationnaires de Navier-Stokes. Ce filtrage fait apparaître des termes non-résolus (termes de *sous-maille*) dans les équations qui doivent alors être modélisés. Les équations filtrées sont résolues en temps et en espace sur la grille de calcul. Ainsi la simulation LES permet de résoudre les grandes structures spatiales turbulentes de l'écoulement liées notamment à la géométrie de la configuration, tandis que les plus petites échelles de la turbulence (plus petites que la taille des mailles de la grille de calcul) ne sont considérées que par les phénomènes de dissipation qu'elles génèrent localement dans l'écoulement. Son extension aux écoulements dispersés dans AVBP a fait l'objet des travaux de thèse de Riber (2007). Les équations issues du formalisme eulérien *mésoscopique* (Février *et al.*, 2005) sont, de la même façon que les équations gazeuses, filtrées spatialement. Les modèles de fermeture des termes de *sous-maille* ont été testés *a priori* dans les travaux de thèse de Moreau (2006).

L'ensemble des méthodes numériques et des modèles utilisés dans cette thèse étaient déjà implantés dans AVBP au début de mes travaux de thèse ou l'ont été grâce au travail collaboratif de l'équipe de développement d'AVBP. Le travail de thèse a donc bénéficié d'un code numérique opérationnel et efficace.

Dans cette première partie du manuscrit, les équations de conservation pour les phases gazeuse et dispersée sont rappelées, afin de définir les variables transportées et de situer le niveau de modélisation employée dans les simulations réalisées et analysées dans ce manuscrit. Le code AVBP résout les équations compressibles et multi-espèces de Navier-Stokes

filtrées pour la dynamique et la thermique de la phase porteuse. Le système d'équations résolues pour la phase gazeuse est donné avant et après filtrage spatial au Chapitre 2. Les équations filtrées de l'approche Euler-Euler *mésoscopique* sont résolues pour la dynamique et la thermique de la phase dispersée. Les étapes de la mise en équations de la dynamique de la phase dispersée sont résumées au Chapitre 3, ainsi que les termes de couplage entre les phases. Le système final obtenu après le filtrage spatial de la simulation aux grandes échelles est donné dans la dernière section du Chapitre 3.

Chapitre 2

Équations de conservation pour les écoulements gazeux compressibles

Sommaire

2.1	Équations et variables conservatives	34
2.1.1	Définition des variables conservatives pour la phase gazeuse . . .	34
2.1.2	Flux convectifs	34
2.1.3	Flux diffusifs	35
2.2	Thermodynamique du gaz	35
2.2.1	Tabulation des enthalpies et entropies sensibles	35
2.2.2	Loi d'état des gaz parfaits	36
2.3	Modèle de transport et de diffusion	37
2.3.1	Diffusion moléculaire	37
2.3.2	Diffusion de la chaleur	38
2.3.3	Définition des coefficients de diffusion	38
2.4	Équations LES pour la phase gazeuse	39
2.4.1	Filtrage LES des équations de Navier-Stokes	39
2.4.2	Flux convectifs résolus	40
2.4.3	Flux diffusifs résolus en écoulement non réactif	41
2.4.4	Filtrage des termes non-linéaires	41
2.4.5	Flux de sous-maille	42
2.4.6	Modèle de WALE pour le calcul de la viscosité turbulente	44

2.1 Équations et variables conservatives

2.1.1 Définition des variables conservatives pour la phase gazeuse

On écrit les équations de conservation pour la phase gazeuse d'un écoulement multi-espèces diphasique non-réactif sous la forme suivante :

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F} = \mathbf{s}_{l-g} \quad (2.1)$$

$\mathbf{w} = (\rho u, \rho v, \rho w, \rho E, \rho_k)^T$ est le vecteur des variables conservatives avec respectivement ρ , u , v , w , E et ρ_k , la masse volumique, les trois composantes du vecteur vitesse $\mathbf{u} = (u, v, w)^T$, l'énergie totale non chimique et la masse volumique partielle de l'espèce k définie par $\rho_k = \rho Y_k$ avec Y_k la fraction massique de l'espèce k , k variant de 1 à N , N étant le nombre d'espèces. $\mathbf{F}$ est le tenseur des flux que l'on décompose de façon classique en une partie non diffusive et une partie diffusive :

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^I(\mathbf{w}) + \mathbf{F}^V(\mathbf{w}, \nabla \mathbf{w}) \quad (2.2)$$

$\mathbf{s}_{l-g}$ est le vecteur des termes sources dûs aux effets de la phase liquide sur la phase gazeuse. Il sera défini au Chapitre 3, §-3.2.3.

Le tenseur des flux non-diffusifs ou convectifs et le tenseur des flux diffusifs se décomposent selon 3 composantes :

$$\mathbf{F}^I = (\mathbf{f}^I, \mathbf{g}^I, \mathbf{h}^I)^T \quad (2.3)$$

$$\mathbf{F}^V = (\mathbf{f}^V, \mathbf{g}^V, \mathbf{h}^V)^T \quad (2.4)$$

2.1.2 Flux convectifs

Les trois composantes du tenseur des flux non diffusifs $\mathbf{F}^I(\mathbf{w})$ s'écrivent :

$$\mathbf{f}^I = \begin{pmatrix} \rho u^2 + P \\ \rho uv \\ \rho uw \\ (\rho E + P)u \\ \rho_k u \end{pmatrix}, \quad \mathbf{g}^I = \begin{pmatrix} \rho uv \\ \rho v^2 + P \\ \rho vw \\ (\rho E + P)v \\ \rho_k v \end{pmatrix}, \quad \mathbf{h}^I = \begin{pmatrix} \rho uw \\ \rho vw \\ \rho w^2 + P \\ (\rho E + P)w \\ \rho_k w \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

où la pression hydrostatique P est déterminée par l'équation d'état des gaz parfaits donnée à l'Eq. (2.17). Ces flux conduisent aux équations d'Euler pour les 4 premières équations qui traduisent la conservation de la quantité de mouvement et d'énergie dans un volume de fluide élémentaire. Les k dernières équations traduisent le transport convectif des espèces chimiques du mélange multi-espèces. Leur somme n'est autre que l'équation de continuité traduisant la conservation de la masse totale sous phase gazeuse.

2.1.3 Flux diffusifs

Les trois composantes du tenseur des flux diffusifs $\mathbf{F}^V(\mathbf{w}, \mathbf{w})$ s'écrivent :

$$\begin{aligned} \mathbf{f}^V &= \begin{pmatrix} -\tau_{xx} \\ -\tau_{xy} \\ -\tau_{xz} \\ -(u\tau_{xx} + v\tau_{xy} + w\tau_{xz}) + q_x \\ J_{x,k} \end{pmatrix} \\ \mathbf{g}^V &= \begin{pmatrix} -\tau_{xy} \\ -\tau_{yy} \\ -\tau_{yz} \\ -(u\tau_{xy} + v\tau_{yy} + w\tau_{yz}) + q_y \\ J_{y,k} \end{pmatrix} \\ \mathbf{h}^V &= \begin{pmatrix} -\tau_{xz} \\ -\tau_{yz} \\ -\tau_{zz} \\ -(u\tau_{xz} + v\tau_{yz} + w\tau_{zz}) + q_z \\ J_{z,k} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.6)$$

où τ est le tenseur des contraintes visqueuses. μ , la viscosité dynamique, $J_{i,k}$, le flux diffusif de l'espèce k dans la direction i et q_i , le flux diffusif de chaleur seront défini à la section 2.3.

τ est défini par :

$$\tau_{ij} = 2\mu \left(S_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} S_{ll} \right) \quad (2.7)$$

$$\text{avec : } S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (2.8)$$

où S_{ij} est le tenseur des déformations. Ces flux conduisent aux équations de Navier-Stokes pour un mélange gazeux multi-espèces.

Note : Par la suite, en l'absence de précision, les indices i, j et l désignent l'une des trois directions de l'espace. Leur répétition implique une sommation sur ces trois directions (notation d'Einstein). Dans tout ce document, l'indice k représente uniquement la $k^{\text{ième}}$ espèce et ne suit pas la règle de sommation (sauf dans les cas mentionnés).

2.2 Thermodynamique du gaz

2.2.1 Tabulation des enthalpies et entropies sensibles

Les propriétés thermodynamiques sont définies pour chaque espèce gazeuse. L'état de référence est pris à la pression $P_0 = 1 \text{ bar}$ et à la température $T_0 = 0 \text{ K}$. Les enthalpies

$h_{s,k}$ et entropies s_k sensibles de chaque espèce sont tabulées tous les 100 K de 0 à 5000 K et sont définies respectivement par les Eqs. (2.9) et (2.10). Le symbole $\sim$ correspond à la valeur tabulée d'indice i et l'exposant m représente une valeur molaire. $h_{s,k}^m$, s_k^m et la masse molaire W_k sont déterminées à partir de la table JANAF (Stull & Prophet, 1971). Enfin, l'énergie sensible de l'espèce k est donnée par l'Eq. (2.11) où r_k est fourni par l'Eq. (2.19).

$$h_{s,k}(T_i) = \int_{T_0=0K}^{T_i} C_{p,k} dT = \frac{h_{s,k}^m(T_i) - h_{s,k}^m(T_0)}{W_k}, \quad i = 1, 51 \quad (2.9)$$

$$s_k(T_i) = \frac{s_k^m(T_i) - s_k^m(T_0)}{W_k}, \quad i = 1, 51 \quad (2.10)$$

$$e_{s,k}(T_i) = \int_{T_0=0K}^{T_i} C_{v,k} dT = h_{s,k}(T_i) - r_k T_i \quad i = 1, 51 \quad (2.11)$$

Les capacités calorifiques à pression constante $C_{p,k}$ et à volume constant $C_{v,k}$ sont supposées constantes entre T_i et $T_{i+1} = T_i + 100 K$. Elles sont respectivement déterminées par les Eqs. (2.12) et (2.13). L'énergie sensible de l'espèce k est définie par une interpolation linéaire via la température (Eq. (2.14)). L'énergie sensible et l'enthalpie sensible du mélange sont respectivement définies par les Eqs. (2.15) et (2.16).

$$C_{p,k} = \frac{\partial h_{s,k}}{\partial T} \quad (2.12)$$

$$C_{v,k} = \frac{\partial e_{s,k}}{\partial T} \quad (2.13)$$

$$e_{s,k}(T) = e_{s,k}(T_i) + (T - T_i) \frac{e_{s,k}(T_{i+1}) - e_{s,k}(T_i)}{T_{i+1} - T_i} \quad (2.14)$$

$$\rho e_s = \sum_{k=1}^N \rho_k e_{s,k} = \rho \sum_{k=1}^N Y_k e_{s,k} \quad (2.15)$$

$$\rho h_s = \sum_{k=1}^N \rho_k h_{s,k} = \rho \sum_{k=1}^N Y_k h_{s,k} \quad (2.16)$$

2.2.2 Loi d'état des gaz parfaits

La phase gazeuse est considérée comme un mélange de N gaz parfaits, son équation d'état s'écrit donc :

$$P = \rho \frac{\mathcal{R}}{\overline{W}} T \quad (2.17)$$

$$\text{avec : } \frac{1}{\overline{W}} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} \quad (2.18)$$

où $\bar{W}$ est la masse molaire du mélange. La constante du mélange $\bar{r}$ et les capacités calorifiques $\bar{C}_p$ et $\bar{C}_v$ dépendent des fractions massiques de chaque espèce :

$$\bar{r} = \frac{\mathcal{R}}{\bar{W}} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{\bar{W}_k} \mathcal{R} = \sum_{k=1}^N Y_k r_k \quad (2.19)$$

$$\bar{C}_p = \sum_{k=1}^N Y_k C_{p,k} \quad (2.20)$$

$$\bar{C}_v = \sum_{k=1}^N Y_k C_{v,k} \quad (2.21)$$

où $\mathcal{R} = 8.3143 \text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$ est la constante universelle des gaz parfaits. L'exposant polytropique du mélange est donné par $\gamma = \bar{C}_p/\bar{C}_v$. La constante du mélange, les capacités calorifiques et l'exposant polytropique dépendent de la composition locale du mélange définie par les fractions massiques $Y_k(x, t)$. Elles sont donc dépendantes de l'espace et du temps :

$$\bar{r} = \bar{r}(x, t), \quad \bar{C}_p = \bar{C}_p(x, t), \quad \bar{C}_v = \bar{C}_v(x, t), \quad \text{et} \quad \gamma = \gamma(x, t) \quad (2.22)$$

À partir de l'énergie sensible, on déduit la température en utilisant les Eq. 2.14 et 2.15. Enfin, les conditions limites NSCBC (Poinot & Lele, 1992) et le calcul du nombre CFL (mentionnés au Chapitre 4) nécessitent le calcul de la vitesse du son du mélange c définie pour un mélange parfait par :

$$c^2 = \gamma \bar{r} T \quad (2.23)$$

2.3 Modèle de transport et de diffusion

2.3.1 Diffusion moléculaire

Dans un écoulement multi-espèces, la conservation de la masse totale implique que l'Eq. (2.24) soit satisfaite. $\mathbf{V}^k$ représente la vitesse de diffusion de l'espèce k ($k = 1, \dots, N$) et s'exprime en utilisant l'approximation d'Hirschfelder-Curtis donnée à l'Eq. (2.25). Cette expression fait intervenir les gradients des fractions molaires X_k définies par $X_k = Y_k \bar{W}/W_k$. Exprimée en terme de fractions massiques, l'Eq. (2.25) devient l'Eq. (2.26). L'approximation d'Hirschfelder-Curtis conduit exactement à la loi de Fick pour un mélange binaire.

$$\sum_{k=1}^N Y_k V_i^k = 0 \quad (2.24)$$

$$X_k V_i^k = -D_k \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (2.25)$$

$$Y_k V_i^k = -D_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (2.26)$$

où D_k est la diffusivité de l'espèce k dans le mélange. Si on somme les k équations Eq. (2.26), la conservation de la masse totale exprimée par l'Eq. (2.24) n'est pas nécessairement respectée. Il est alors nécessaire d'ajouter la contribution d'une vitesse de diffusion corrective notée $\mathbf{V}^c$ pour assurer la conservation de la masse totale de gaz. Cette vitesse de correction est donnée à l'Eq. (2.27) (Poinsot & Veynante, 2005). Le flux de diffusion des espèces $\mathbf{J}_k$ qui prend en compte cette correction s'écrit alors selon l'Eq. (2.28).

$$V_i^c = \sum_{k=1}^N D_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (2.27)$$

$$J_{i,k} = \rho Y_k \left(V_i^k + V_i^c \right) = -\rho \left(D_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right) \quad (2.28)$$

2.3.2 Diffusion de la chaleur

Le flux de chaleur total $\mathbf{q}$ est la somme de deux termes : le flux de chaleur par conduction, que l'on modélise par une loi de Fourier, et le flux de chaleur dû à la diffusion des espèces. Ces deux termes sont détaillés dans l'Eq. (2.30).

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N J_{i,k} h_{s,k} \quad (2.29)$$

$$q_i = \underbrace{-\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}}_{\text{conduction}} + \underbrace{-\rho \sum_{k=1}^N \left(D_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right) h_{s,k}}_{\text{diffusion des espèces}} \quad (2.30)$$

où λ est la conductivité thermique du mélange.

2.3.3 Définition des coefficients de diffusion

Dans la plupart des codes de mécanique des fluides utilisant un mélange de plusieurs espèces, la viscosité dynamique μ est supposée indépendante de la composition du mélange et proche de celle de l'air¹. La loi puissance (Eq. 2.31) est une approximation réaliste qui prend en compte les variations de la viscosité dynamique en fonction de la température.

$$\mu = \mu_{ref} \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^b \quad (2.31)$$

où μ_{ref} est la viscosité mesurée à la température T_{ref} .

La conductivité thermique du mélange est définie par l'Eq. (2.32) qui utilise un nombre

¹Les erreurs liées à cette hypothèse sont faibles tant que le mélange est dilué dans l'air (Schmitt, 2009).

de Prandtl Pr supposé constant. La diffusivité thermique est définie par l'Eq. (2.33).

$$\lambda = \frac{\mu \overline{C_p}}{Pr} \quad (2.32)$$

$$D_{th} = \frac{\mu}{\rho Pr} \quad (2.33)$$

Pour la diffusion molaire, on adopte une approche simplifiée en faisant l'hypothèse que les nombres de Schmidt de chaque espèce Sc_k sont constants. La diffusivité moléculaire D_k est alors définie par :

$$D_k = \frac{\mu}{\rho Sc_k} \quad (2.34)$$

où Sc_k est le nombre de Schmidt de l'espèce k supposé constant.

Pr et Sc_k modélisent la diffusion laminaire thermique et moléculaire. Leurs valeurs sont obtenues à l'aide du logiciel CANTERA (Goodwin, 2009) en calculant leur valeur dans le mélange considéré.

2.4 Équations LES pour la phase gazeuse

2.4.1 Filtrage LES des équations de Navier-Stokes

La procédure de filtrage évoquée en introduction consiste à définir la quantité filtrée $\bar{f}$ comme le produit de convolution de la quantité non filtrée f avec un filtre spatial G_Δ de taille caractéristique :

$$\bar{f}(x) = \int f(x') G_\Delta(x' - x) dx' \quad (2.35)$$

Le filtre G_Δ est classiquement de type boîte ou gaussien (Sagaut, 1998b). La quantité filtrée $\bar{f}$ est calculée en résolvant numériquement son équation de transport. La quantité de sous-maille non résolue est $f' = f - \bar{f}$. Pour les écoulements à masse volumique variable, il est pratique d'utiliser une moyenne pondérée par la masse volumique, appelée *moyenne de Favre*, définie par :

$$\tilde{f} = \frac{\rho f}{\bar{\rho}} \quad (2.36)$$

On obtient les équations de conservation de type LES en filtrant les équations de Navier-Stokes instantanées (Eq. 2.1) :

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{w}}}{\partial t} + \bar{\mathbf{w}} \cdot \bar{\mathbf{F}} = \bar{\mathbf{s}}_{l-g} \quad (2.37)$$

où $\bar{\mathbf{s}}_{l-g}$ est le terme source filtré et $\bar{\mathbf{F}}$ est le tenseur des flux filtrés composé de trois

contributions :

$$\bar{\mathbf{F}} = \bar{\mathbf{F}}^I + \bar{\mathbf{F}}^V + \bar{\mathbf{F}}^t \quad (2.38)$$

avec

$$\text{tenseur des flux convectifs résolus : } \bar{\mathbf{F}}^I = \left(\bar{\mathbf{f}}^I, \bar{\mathbf{g}}^I, \bar{\mathbf{h}}^I \right)^T \quad (2.39)$$

$$\text{tenseur des flux diffusifs résolus : } \bar{\mathbf{F}}^V = \left(\bar{\mathbf{f}}^V, \bar{\mathbf{g}}^V, \bar{\mathbf{h}}^V \right)^T \quad (2.40)$$

$$\text{tenseur des flux de sous-maille : } \bar{\mathbf{F}}^t = \left(\bar{\mathbf{f}}^t, \bar{\mathbf{g}}^t, \bar{\mathbf{h}}^t \right)^T \quad (2.41)$$

De manière classique, pour établir les équations filtrées, on suppose qu'il y a commutation entre l'opérateur de filtrage et les opérateurs de dérivée partielle.

En pratique l'opération de filtrage définie à l'Eq. (2.35) n'est pas effectuée, on parle de filtrage implicite : l'échelle de coupure est fixée par la taille de la maille, toutes les échelles en dessous de la taille de la cellule ne sont pas résolues. Ainsi en LES, la construction du maillage du domaine de calcul devient une étape importante voire essentielle pour le calcul. Le choix de l'évolution des tailles des cellules du maillages conditionne l'intensité de l'application du modèle de sous-maille. Les variations dans la taille du filtre dues à la non-uniformité du maillage ne sont pas prises en compte dans la modélisation de sous-maille.

2.4.2 Flux convectifs résolus

Les trois composantes du tenseur des flux convectifs résolus $\bar{\mathbf{F}}^I$ sont définies par :

$$\bar{\mathbf{f}}^I = \begin{pmatrix} \overline{\rho \tilde{u}^2} + \bar{P} \\ \overline{\rho \tilde{u} \tilde{v}} \\ \overline{\rho \tilde{u} \tilde{w}} \\ \overline{\rho \tilde{E} \tilde{u}} + \bar{P} \overline{u} \\ \overline{\rho_k \tilde{u}} \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{g}}^I = \begin{pmatrix} \overline{\rho \tilde{u} \tilde{v}} \\ \overline{\rho \tilde{v}^2} + \bar{P} \\ \overline{\rho \tilde{v} \tilde{w}} \\ \overline{\rho \tilde{E} \tilde{v}} + \bar{P} \overline{v} \\ \overline{\rho_k \tilde{v}} \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{h}}^I = \begin{pmatrix} \overline{\rho \tilde{u} \tilde{w}} \\ \overline{\rho \tilde{v} \tilde{w}} \\ \overline{\rho \tilde{w}^2} + \bar{P} \\ \overline{\rho \tilde{E} \tilde{w}} + \bar{P} \overline{w} \\ \overline{\rho_k \tilde{w}} \end{pmatrix} \quad (2.42)$$

2.4.3 Flux diffusifs résolus en écoulement non réactif

Les trois composantes du tenseur des flux diffusifs résolus $\bar{\mathbf{F}}^V$ sont définies par :

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{f}}^V &= \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xx}} \\ -\overline{\tau_{xy}} \\ -\overline{\tau_{xz}} \\ -(\overline{u \tau_{xx}} + \overline{v \tau_{xy}} + \overline{w \tau_{xz}}) + \overline{q_x} \\ \overline{J_{x,k}} \end{pmatrix} \\ \bar{\mathbf{g}}^V &= \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xy}} \\ -\overline{\tau_{yy}} \\ -\overline{\tau_{yz}} \\ -(\overline{u \tau_{xy}} + \overline{v \tau_{yy}} + \overline{w \tau_{yz}}) + \overline{q_y} \\ \overline{J_{y,k}} \end{pmatrix} \\ \bar{\mathbf{h}}^V &= \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xz}} \\ -\overline{\tau_{yz}} \\ -\overline{\tau_{zz}} \\ -(\overline{u \tau_{xz}} + \overline{v \tau_{yz}} + \overline{w \tau_{zz}}) + \overline{q_z} \\ \overline{J_{z,k}} \end{pmatrix}\end{aligned}\tag{2.43}$$

2.4.4 Filtrage des termes non-linéaires

Les flux ainsi résolus font apparaître des termes non-linéaires filtrés. Ceux-ci sont simplement évalués par le produit des différents termes filtrés (Poinsot & Veynante, 2005).

Le tenseur des contraintes résolues $\overline{\tau_{ij}}$

Les termes de contraintes résolues $\overline{\tau_{ij}}$ sont simplement évalués selon :

$$\overline{\tau_{ij}} = \overline{2\mu \left(S_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} S_{ll} \right)}\tag{2.44}$$

$$\text{approximation : } \overline{\tau_{ij}} \approx 2\bar{\mu} \left(\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tilde{S}_{ll} \right)\tag{2.45}$$

$$\text{avec : } \tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right)\tag{2.46}$$

$$\bar{\mu} \approx \mu(\tilde{T})\tag{2.47}$$

Tenseur de diffusion des espèces filtré $\overline{J_{i,k}}$

Les variations spatiales des flux résolus de diffusion moléculaire $\overline{J_{i,k}}$ sont considérées comme suffisamment faibles pour être évaluées par un modèle de type gradient.

$$\text{en non réactif : } \quad \overline{J_{i,k}} = -\rho \overline{\left(D_k \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right)} \quad (2.48)$$

$$\text{approximation : } \quad \overline{J_{i,k}} \approx -\bar{\rho} \left(\bar{D}_k \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i} - \tilde{Y}_k \tilde{V}_i^c \right) \quad (2.49)$$

$$\text{avec : } \quad \tilde{V}_i^c = \sum_{k=1}^N \bar{D}_k \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i} \quad (2.50)$$

$$\bar{D}_k \approx \frac{\bar{\mu}}{\bar{\rho} Sc_k} \quad (2.51)$$

Flux de chaleur filtré $\overline{q_i}$

$$\text{en non réactif : } \quad \overline{q_i} = -\bar{\lambda} \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \overline{J_{i,k} h_{s,k}} \quad (2.52)$$

$$\text{approximation : } \quad \overline{q_i} \approx -\bar{\lambda} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \overline{J_{i,k}} \tilde{h}_{s,k} \quad (2.53)$$

$$\text{avec : } \quad \bar{\lambda} \approx \frac{\bar{\mu} \overline{C_p}(\tilde{T})}{Pr} \quad (2.54)$$

2.4.5 Flux de sous-maille

Les trois composantes du tenseur de sous-maille $\overline{\mathbf{F}}^t$ sont définies par :

$$\overline{\mathbf{f}}^t = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xx}}^t \\ -\overline{\tau_{xy}}^t \\ -\overline{\tau_{xz}}^t \\ \overline{q_x}^t \\ \overline{J_{x,k}}^t \end{pmatrix}, \quad \overline{\mathbf{g}}^t = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xy}}^t \\ -\overline{\tau_{yy}}^t \\ -\overline{\tau_{yz}}^t \\ \overline{q_y}^t \\ \overline{J_{y,k}}^t \end{pmatrix}, \quad \overline{\mathbf{h}}^t = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xz}}^t \\ -\overline{\tau_{yz}}^t \\ -\overline{\tau_{zz}}^t \\ \overline{q_z}^t \\ \overline{J_{z,k}}^t \end{pmatrix} \quad (2.55)$$

Les termes de sous-mailles sont modélisés par leur effets dissipatifs sur les échelles résolues. Cet effet vient de la théorie de cascade énergétique élaborée par Kolmogorov (1941) : les petites échelles reçoivent l'énergie de l'écoulement contenues essentiellement dans les grandes échelles, via le processus de transfert énergétique rempli par les échelles

dites inertielles. Dans les fermetures présentées ci-dessous, on voit apparaître le terme ν_t de viscosité turbulente qui doit être modélisé.

Tenseur des contraintes de sous-maille $\overline{\tau_{ij}}^t$

$$\overline{\tau_{ij}}^t = -\bar{\rho} (\widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u_i} \widetilde{u_j}) \quad (2.56)$$

$$\text{modèle : } \overline{\tau_{ij}}^t = 2 \bar{\rho} \nu_t \left(\widetilde{S_{ij}} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \widetilde{S_{ll}} \right) \quad (2.57)$$

La viscosité turbulente ν_t est calculée par le modèle de sous-maille donné au §-2.4.6.

Tenseur de diffusion des espèces de sous-maille $\overline{J_{i,k}}^t$

$$\overline{J_{i,k}}^t = \bar{\rho} (\widetilde{u_i Y_k} - \widetilde{u_i} \widetilde{Y_k}) \quad (2.58)$$

$$\text{modèle : } \overline{J_{i,k}}^t = -\bar{\rho} \left(D_k^t \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial \widetilde{X_k}}{\partial x_i} - \widetilde{Y_k} \widetilde{V_i^{c,t}} \right) \quad (2.59)$$

$$\text{avec : } \widetilde{V_i^{c,t}} = \sum_{k=1}^N D_k^t \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial \widetilde{X_k}}{\partial x_i} \quad (2.60)$$

$$D_k^t = \frac{\nu_t}{Sc_k^t} \quad (2.61)$$

Le nombre de Schmidt turbulent est fixé dans les simulations à $Sc_k^t = 0.6$ pour toutes les espèces.

Flux de chaleur de sous-maille $\overline{q_i}^t$

$$\overline{q_i}^t = \bar{\rho} (\widetilde{u_i E} - \widetilde{u_i} \widetilde{E}) \quad (2.62)$$

$$\text{modèle : } \overline{q_i}^t = -\lambda_t \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \overline{J_{i,k}}^t \widetilde{h_{s,k}} \quad (2.63)$$

$$\text{avec : } \lambda_t = \frac{\bar{\rho} \nu_t \overline{C_p}}{Pr_t} \quad (2.64)$$

Dans les simulations de ces travaux de thèse, le nombre de Prandtl turbulent a été fixé à $Pr_t = 0.6$, pour assurer un nombre de Lewis “turbulent” unitaire.

2.4.6 Modèle de WALE pour le calcul de la viscosité turbulente

Plusieurs modèles plus ou moins complexes existe dans la littérature pour évaluer l'effet dissipatif des petites échelles de l'écoulement (Lesieur, 1997; Sagaut, 1998a; Pope, 2000). Les simulations réalisées dans cette thèse emploient le modèle de WALE développé par Nicoud & Ducros (1999). Ce modèle simple adapte la viscosité de sous maille en fonction de la distance à la paroi. Il permet d'être utilisé en combinaison d'une paroi adhérente sans traitement particulier à la paroi. Il est connu également pour donner de bons résultats dans les couches de cisaillement.

Dans ce modèle, la viscosité turbulente est définie par :

$$\nu_t = (C_w)^2 \frac{(s_{ij}^d s_{ij}^d)^{3/2}}{(\tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij})^{5/2} + (s_{ij}^d s_{ij}^d)^{5/4}} \quad (2.65)$$

C_w est la constante du modèle de Smagorinsky dont la valeur est fixée à : $C_w = 0.4929$.

où s_{ij}^d est la partie déviatrice du taux de déformations résolu :

$$s_{ij}^d = \frac{1}{2} (\tilde{g}_{ij}^2 + \tilde{g}_{ji}^2) - \frac{1}{3} \tilde{g}_{kk}^2 \delta_{ij} \quad (2.66)$$

où $\tilde{g}_{ij}$ est la partie irrotationnelle du tenseur des contraintes résolu.

Chapitre 3

Équations de conservation pour la phase dispersée

Sommaire

3.1	Introduction	45
3.1.1	Approche lagrangienne	46
3.1.2	Approche eulérienne	48
3.2	Fermeture des équations pour l’approche Eulérienne	51
3.2.1	Cadre de la modélisation	51
3.2.2	Ecriture sous forme matricielle	52
3.2.3	Traitement du couplage inverse entre les phases	54
3.2.4	Modèles de couplage entre les phases	54
3.2.5	Modèles de fermeture pour le mouvement décorrélié	61
3.3	Équations LES pour la phase dispersée	62
3.3.1	Filtrage LES des équations de conservation	62
3.3.2	Flux mésoscopiques résolus	63
3.3.3	Flux décorrélés résolus	63
3.3.4	Filtrage des termes non-linéaires	64
3.3.5	Flux de sous-maille	64
3.3.6	Termes sources d’énergie décorrélée résolue	66
3.3.7	Termes sources de couplage pour les variables résolues	66
3.3.8	Termes sources de couplage inverse des équations filtrés	68

3.1 Introduction

Contrairement aux écoulements de fluides newtoniens qui sont majoritairement décrits par une théorie des milieux continus avec un point de vue eulérien, la dynamique des sprays

peut être abordée sous différentes approches théoriques. Dans l'approche lagrangienne (notée L), on considère la phase dispersée comme un ensemble de particules discrètes de petite taille auxquelles on applique la mécanique du point. Dans l'approche eulérienne (notée E), le spray est vu comme un milieu continu analogue à un fluide et constitué des propriétés moyennes locales de l'ensemble des particules. Dans le code AVBP le solveur Eulérien est développé depuis les travaux de thèse de Kaufmann (2004) et un solveur Lagrangien a récemment été développé grâce aux travaux de García (2009). Ce travail de thèse s'est essentiellement porté sur l'approche Eulérienne. Des résultats de simulations réalisées par J.M. Senoner avec le solveur Lagrangien d'AVBP sont employés au Chapitre 10 afin de comparer les performances respectives des approches Lagrangienne et Eulérienne mises en oeuvre dans AVBP. Afin de comprendre le choix fait dans cette étude, les approches Lagrangienne et Eulérienne sont présentées de manière succincte. Pour une description plus détaillée de la dérivation des équations Euler-Euler en moyenne statistique, le lecteur est invité à lire la section 2 du Chapitre 3 de la thèse de Boileau (2007).

Note : Par la suite, on parle indifféremment de phase dispersée ou de phase liquide pour définir le spray de gouttelettes (appelées particules dans le formalisme eulérien statistique). Par opposition, l'écoulement gazeux est appelé phase continue, phase porteuse ou phase gazeuse.

3.1.1 Approche lagrangienne

La description Euler-Lagrange (EL) *déterministe* du spray consiste à suivre la trajectoire lagrangienne (L) de *chaque* gouttelette du spray en lui appliquant les transferts de quantité de mouvement, de masse et de chaleur avec le gaz porteur dont l'écoulement est décrit du point de vue eulérien (E). À chaque instant, on résout le système suivant pour chaque gouttelette (k) présente dans l'écoulement :

$$\frac{dX_{p,i}^{(k)}}{dt} = V_{p,i}^{(k)} \quad (3.1)$$

$$\frac{d}{dt} \left(m_p^{(k)} V_{p,i}^{(k)} \right) = F_{p,i}^{(k)} \quad (3.2)$$

$$\frac{dm_p^{(k)}}{dt} = m_p^{(k)} \quad (3.3)$$

$$\frac{d}{dt} \left(m_p^{(k)} C_p^{(k)} T_p^{(k)} \right) = Q_p^{(k)} \quad (3.4)$$

avec $\vec{X}_p^{(k)}$ la position de la goutte, $\vec{V}_p^{(k)}$ sa vitesse, $m_p^{(k)}$ sa masse, $C_p^{(k)}$ sa chaleur spécifique à pression constante, $T_p^{(k)}$ sa température, $\mathbf{F}_p^{(k)}$ les forces extérieures agissant sur la goutte, $m_p^{(k)}$ le taux d'évaporation et $Q_p^{(k)}$ le taux de transfert de chaleur avec le gaz porteur.

Le principal avantage de la méthode EL est l'absence de modélisation nécessaire pour traiter des problèmes tels que les effets de polydispersion (particules de différents diamètres) et de croisement de trajectoires. Couplée aux méthodes qui modélisent tout ou partie de la turbulence de la phase gazeuse, elle requiert néanmoins une méthode d'évaluation des efforts du gaz à l'endroit de la particule. Elle est donc couramment employée

dans les codes DNS (Squires & Eaton, 1990; Boivin *et al.*, 1998; Vermorel *et al.*, 2003; Péra, 2005), qui résolvent l'ensemble des échelles de la turbulence, et son potentiel en LES a été démontré (Boivin *et al.*, 2000; Pandya & Mashayek, 2002; Mashayek & Pandya, 2003; Apte *et al.*, 2003). L'approche Lagrangienne est également utilisée pour des simulations RANS de configurations industrielles, en modélisant l'effet de la turbulence sur la dispersion des particules (Sakiz & Simonin, 1998; Pozorski & Minier, 1998; MacManus & Eaton, 2000; Squires & Eaton, 1994). Elle est par exemple implantée dans des codes comme KIVA, IFP-C3D, StarCD, FIRE, ... L'approche Lagrangienne implantée dans le solveur AVBP (García, 2009) n'utilise pas de modèle pour reconstruire l'effet de sous-maille du gaz porteur sur les efforts et les échanges exercés sur les particules suivies.

Sur le plan numérique, la localisation des particules sur la grille eulérienne nécessite des algorithmes performants. Dans le cas de calculs parallèles par décomposition de domaine, l'échange de particules entre processeurs est une tâche délicate (García, 2009). Une fois les particules repérées, des interpolations sont nécessaires pour transférer les termes de couplage de la grille eulérienne aux particules et inversement. Si l'on souhaite éviter une diffusion numérique importante lors de ces interpolations, des schémas d'ordre élevé donc coûteux en temps de calcul sont requis. Dans les calculs réalisés par J.M. Senoner, dont les résultats seront utilisés au Chapitre 10, une interpolation du second ordre, par la méthode des moindres carrés, est employée. L'intégration temporelle des équations Eqs. (3.1)–(3.4) est réalisée par une méthode explicite du 1^{er} ordre.

Sur le plan informatique, le suivi instantané de plusieurs millions voire centaines de millions de particules implique des ressources de calculs et des besoins en mémoire qui dépassent les capacités des calculateurs d'aujourd'hui. Ce problème est généralement résolu en regroupant plusieurs particules initialement proches dans le domaine de calcul dans une particule numérique appelée *parcel* en anglais. Le nombre de *parcels* à suivre est alors considérablement réduit mais une modélisation supplémentaire devient nécessaire (Moin, 2004). De plus, afin d'assurer la convergence statistique et d'éviter des discontinuités trop fortes des termes sources de couplage, un tel calcul doit conserver un nombre significatif de particules (Jaegle, 2009).

Pour un calcul LES parallèle, la décomposition en domaines est la méthode la plus efficace lorsqu'on utilise un grand nombre de processeurs. Toutefois, un maillage découpé pour le solveur gazeux n'est pas optimisé pour le solveur lagrangien. En effet, la distribution de particules dans le domaine de calcul peut être très différente de la distribution de cellules eulériennes et varie généralement au cours du temps. Un très grand nombre de trajectoires lagrangiennes sont alors calculées par quelques processeurs, ce qui réduit fortement l'efficacité du calcul parallèle. Dans un calcul de remplissage de chambre, par exemple, les particules sont injectées au cours du temps au niveau de l'atomiseur. Les particules se dispersent dans la chambre et s'évaporent au cours du calcul. Les processeurs dont le domaine attribué est situé en amont de l'injecteur liquide ne reçoivent pas de gouttelettes, ceux pour lequel le domaine est à proximité de l'atomiseur reçoivent un très grand nombre de particules. Ce déséquilibre en particules entraîne une baisse des performances de parallélisme (Senoner *et al.*, 2009b). Pour conserver un parallélisme efficace sur des milliers de processeurs, il est alors nécessaire de re-découper le domaine au cours du calcul au moyen d'une méthode d'équilibrage dynamique (Ham *et al.*, 2003).

3.1.2 Approche eulérienne

Les difficultés numériques et informatiques de l'approche EL ont motivé la modélisation des sprays par des approches Euler-Euler (EE). Dans ce cas, on ne s'intéresse pas à l'histoire de chaque particule mais à leurs propriétés moyennes en regardant le spray comme un fluide continu. Parmi les différentes méthodes disponibles détaillées au Chapitre 1, l'approche Euler-Euler *mésoscopique* (Février *et al.*, 2005) a été implantée dans AVBP, en raison notamment du travail sur les modèles de fermeture des tenseurs de vitesse décorrélée (Boivin *et al.*, 1998; Kaufmann *et al.*, 2008) et de sous-mailles (Moreau, 2006) réalisé par le groupe EEC de l'IMFT¹.

L'idée forte de la description *mésoscopique* est de faire une distinction entre les grandeurs d'ensemble d'un volume de particules et les grandeurs propres à chaque particule. Les équations Euler-Euler en moyenne statistique sont obtenues à partir d'un formalisme issu de la théorie cinétique des gaz formulée par Chapman & Cowling (1939). Dans cette thèse les principales étapes de la dérivation sont résumées ci-dessous et les notations ainsi que les différentes étapes sont détaillées dans la thèse de Boileau (2007).

1. On définit une fonction densité de présence de particules (*pdf* en anglais) $f_p(\mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p, \mathbf{x}, t | \mathcal{H}_f)$ conditionnée par une réalisation du fluide porteur $\mathcal{H}_f$. Dans l'espace des réalisations particulières, chaque particule est identifiée par sa position $\mathbf{x}$ à l'instant t , sa masse μ_p , sa vitesse $\mathbf{c}_p$ et sa température ζ_p ².
2. On écrit l'équation de transport de type Boltzmann décrivant l'évolution de cette *pdf*.
3. Au moyen de cette *pdf*, on définit une moyenne statistique locale des propriétés du spray. Les quantités *mésoscopiques* sont définies par la moyenne d'ensemble massique de la quantité particulière Ψ :

$$\check{\Psi} = \Psi_l = \frac{1}{\rho_l \check{\alpha}_l} \int \mu_p \Psi(\mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p) f_p(\mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p, \mathbf{x}, t | \mathcal{H}_f) d\mathbf{c}_p d\zeta_p d\mu_p \quad (3.5)$$

La déviation par rapport à la moyenne *mésoscopique* est notée $\Psi'' - \Psi - \check{\Psi}$. Dans l'approche implantée dans AVBP, les quantités transportées sont : $\check{n}_l$ le nombre de particules par unité de volume, $\check{\alpha}_l$ la fraction volumique de gouttes, $\check{\mathbf{u}}_l$ la vitesse *mésoscopique*, $\delta\check{\theta}_l = \left\langle \frac{1}{2} u_{p,i}'' u_{p,i}'' \right\rangle_l$ l'énergie du mouvement décorrélé et $\check{h}_{s,l}$ l'enthalpie *mésoscopique*. Les grandeurs *mésoscopiques*, et le mouvement décorrélé sont représentés sur le croquis Fig. 3.1.

4. On multiplie l'équation de transport de la *pdf* par une variable quelconque Ψ descriptive du spray, puis on lui applique l'opérateur de moyenne défini précédemment afin d'établir l'équation générale d'Enskog.

¹Groupe Ecoulements et Combustion de l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse.

² ζ_p correspond à une température caractéristique de la goutte. Dans la suite au paragraphe §-3.2.4, les gouttes sont supposées à température uniforme. Pour lever cette hypothèse dans l'approche Eulérienne, il faudrait rajouter des variables à la *pdf* permettant de décrire la répartition de température dans la goutte.

5. En remplaçant Ψ par les quantités appropriées, on établit un système d'équations de conservation pour le mouvement moyen dit *mésoscopique*. Dans les équations aux moments de la vitesse mésoscopique Eq. (3.10) et de l'énergie décorrélée Eq. (3.11) apparaissent les tenseurs double et triple de vitesse décorrélée définis comme :

$$\delta\check{R}_{l,ij} = \langle u''_{p,i} u''_{p,j} \rangle_l \quad (3.6)$$

$$\delta\check{S}_{l,ijk} = \langle u''_{p,i} u''_{p,j} u''_{p,k} \rangle_l \quad (3.7)$$

Les équations de transport pour les grandeurs mésoscopiques, sont données ci-dessous, en notant Γ le taux de transfert de masse du liquide vers le gaz du à l'évaporation, Φ_l le taux de transfert d'enthalpie reçu par le liquide, $\mathbf{F}_d$ la force de traînée exercée par le fluide sur les gouttes et W_θ le taux de transfert d'énergie décorrélée lié à cette force :

$$\frac{\partial}{\partial t} \check{n}_l + \frac{\partial}{\partial x_j} \check{n}_l \check{u}_{l,j} = 0 \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_l \check{\alpha}_l + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,j} = -\Gamma \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,i} \check{u}_{l,j} = -\frac{\partial}{\partial x_j} \rho_l \check{\alpha}_l \delta\check{R}_{l,ij} - \Gamma \check{u}_{l,i} + F_{d,i} \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_l \check{\alpha}_l \delta\check{\theta}_l + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,i} \delta\check{\theta}_l = -\frac{\partial}{\partial x_j} \rho_l \check{\alpha}_l \delta\check{S}_{l,ij} - \rho_l \check{\alpha}_l \delta\check{R}_{l,ij} \frac{\partial}{\partial x_j} \check{u}_{l,i} - \Gamma \delta\check{\theta}_l + W_\theta \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_l \check{\alpha}_l \check{h}_{s,l} + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,i} \check{h}_{s,l} = -\Gamma \check{h}_{s,l} + \Phi_l \quad (3.12)$$

$$\textcircled{1} + \textcircled{2} = \textcircled{3} + \textcircled{4} + \textcircled{5} + \textcircled{6} + \textcircled{7}$$

où les termes notés $\textcircled{1}$ correspondent aux termes de variations temporelles, $\textcircled{2}$ aux termes d'advection par le mouvement mésoscopique, $\textcircled{3}$ aux termes d'advection par le mouvement décorrélé, $\textcircled{4}$ aux effets de l'anisotropie du tenseur des contraintes mésoscopiques, $\textcircled{5}$ aux termes sources liés à l'évaporation, $\textcircled{6}$ aux termes sources liés à la force de traînée, $\textcircled{7}$ aux termes sources liés à la conduction thermique.

6. Les fermetures des équations du mouvement mésoscopique sont données dans la section suivante. Il s'agit de modéliser deux types de termes :
- (a) l'effet du mouvement non résolu ou *décorrélé* qui représente l'écart par rapport au mouvement mésoscopique (termes $\textcircled{3}$ et $\textcircled{4}$),
 - (b) les termes de couplage avec la phase gazeuse via la force de traînée exercée par la phase porteuse sur les particules, les échanges thermiques et massiques entre les phases (termes $\textcircled{5}$, $\textcircled{6}$ et $\textcircled{7}$).

Contrairement à l'approche EL, les équations obtenues par la méthode EE sont proches des équations de la phase gazeuse, ce qui permet d'utiliser les mêmes algorithmes informatiques que le solveur gazeux et de profiter pleinement des capacités de parallélisme. De plus, le couplage informatique ne pose aucun problème puisque la grille de calcul est la

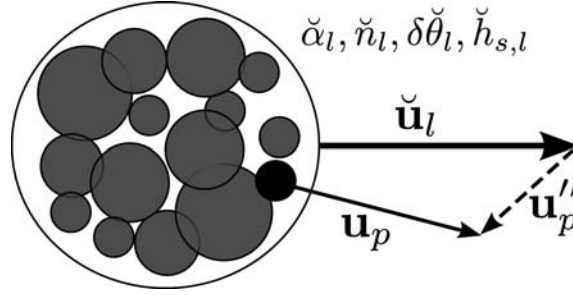


FIG. 3.1: Croquis schématisant un ensemble mésoscopique de particules et les variables qui lui sont associées.

même pour les deux phases³. En d'autres termes, le code de calcul résolvant l'écoulement diphasique en Euler-Euler n'est qu'une extension du code gazeux auquel on ajoute un jeu de variables à transporter ainsi que des modèles pour les termes de fermeture et de couplage. Le temps de calcul n'est alors plus lié aux nombres de particules à transporter mais au nombre d'équations eulériennes décrivant la phase dispersée et la complexité des modèles de fermeture. En général, il ne dépasse pas le double du temps requis pour un calcul monophasique équivalent, et ce, quel que soit le nombre de particules dans le domaine.

Néanmoins, le spray possédant des propriétés analogues à un fluide fortement compressible, la mise en oeuvre de la méthode EE conduit à quelques difficultés numériques. La forte compressibilité des équations Eulériennes dans lesquelles il n'y a ni termes diffusifs, ni termes de pression engendre des fronts très raides des grandeurs mésoscopiques. Les modèles de fermetures du mouvement décorrélié et les termes de couplage entre les phases sont liés aux front de densité de gouttes. Ils génèrent de ce fait des termes sources numériquement très raides. Ces deux phénomènes physiques posent des problèmes numériques qui freinent l'application de cette méthode dans un contexte industriel. Plusieurs solutions existent et sont proposées et étudiées au Chapitre 5.

La principale faiblesse de l'approche EE est sa difficulté à modéliser les configurations où les grandeurs moyennes ne permettent pas de représenter le spray de façon réaliste. C'est le cas en particulier lorsque le spray présente des caractéristiques polydisperses, c'est-à-dire en présence d'une distribution de diamètres de gouttes pour une même position. À partir de l'approche initialement décrite par Greenberg *et al.* (1993), Laurent & Massot (2001) et Laurent *et al.* (2004) proposent une méthode sectionnelle dans laquelle le spray est divisé en sections contenant une classe de diamètre, chaque section nécessitant son propre jeu d'équations eulériennes. Les auteurs montrent que quelques sections suffisent pour représenter de façon réaliste une large distribution de diamètres. Dans sa thèse, Mossa (2005) propose un modèle où la distribution des tailles est présumée et où une équation de transport pour la densité de surface de gouttes permet de prendre en compte les effets polydisperses sur la dynamique du spray.

L'approche EE se heurte également aux cas où les trajectoires de gouttes au sein d'un

³Cela suppose que les variables de la phase liquide soient définies en tout point de la grille de calcul, ce qui implique notamment de conserver une fraction volumique non nulle dans tout le domaine.

même volume de contrôle eulérien sont très différentes⁴. En effet par construction, en tout point on ne définit qu'une seule et unique vitesse mésoscopique. De Chaisemartin (2009) parle de méthode *mono-cinétique*. Toutefois, il est possible d'utiliser la méthode *DQMOM* pour prédire le croisement de trajectoires en formulation eulérienne. De Chaisemartin (2009) définit la méthode Eulérienne ainsi étendue au croisement de gouttes par le terme de *multi-vitesse*.

3.2 Fermeture des équations pour l'approche Eulérienne

3.2.1 Cadre de la modélisation

Nous rappelons ici les hypothèses qui permettent de fermer le système (3.8-3.12). Les hypothèses **H1-H7** sont strictement équivalentes aux hypothèses utilisées pour écrire les équations de suivi des particules dans l'approche lagrangienne. L'hypothèse **H8** permet de relier la densité de particules $\check{n}_l$ et le diamètre d des particules à la fraction volumique.

$$\check{\alpha}_l = \check{n}_l \frac{\pi d^3}{6} \quad (3.13)$$

- H1** - Les particules sont des gouttes sphériques indéformables⁵
- H2** - Le rapport de masse volumique entre le liquide et le gaz permet de supposer que la seule force exercée par le fluide porteur sur les gouttes est la traînée.
- H3** - La température (donc l'enthalpie sensible) est homogène à l'intérieur de chaque goutte. Cela revient à supposer une conductivité infinie dans la phase liquide.
- H4** - L'effet de la gravité est négligeable⁶.
- H5** - L'écoulement est dilué ($\check{\alpha}_l < 0.01$). Par conséquent, les effets d'encombrement volumique de la phase dispersée sur la phase porteuse sont négligeables : la fraction volumique gazeuse vaut $1 - \check{\alpha}_l \equiv 1$.
- H6** - En vertu de l'hypothèse H5, les interactions goutte-goutte sont négligeables : $\mathbb{C} \equiv 0$.
- H7** - En vertu de l'hypothèse H5, la phase porteuse est faiblement altérée par la présence du spray ce qui permet d'utiliser une FDP conditionnée par une réalisation unique de la phase porteuse⁷.

⁴Dans le cas extrême où les trajectoires sont opposées, définir une vitesse moyenne n'a plus de sens...

⁵Cette hypothèse revient à supposer que les phases d'atomisation primaire et secondaire sont achevées.

⁶Cette hypothèse peut être facilement relaxée par l'ajout d'un terme source dans l'équation de quantité de mouvement (Riber, 2007)

⁷Sa validité devra toutefois être discutée dans le cadre de la combustion diphasique où la présence de la flamme crée des échanges importants de masse, de quantité de mouvement et de chaleur entre le gaz porteur et le spray.

- H8** - Toutes les gouttes possèdent localement le même diamètre : le spray est dit mono-disperse. La polydispersion locale représentée sur le croquis de la Fig. 3.1 n'est pas résolue par les variables mésoscopiques transportées.
- H9** - Toutes les gouttes possèdent localement la même température⁸. Cette hypothèse autorise une expression simplifiée des termes sources liés à l'évaporation dans l'équation de quantité de mouvement mésoscopique et dans l'équation sur l'énergie décorrélée.

3.2.2 Ecriture sous forme matricielle

On regroupe les Eqs. (3.8-3.12) sous la forme compacte et conservative utilisée pour la phase gazeuse (cf. section 2.1) :

$$\frac{\partial \mathbf{w}_l}{\partial t} + \mathbf{F}_l = \mathbf{s}_l \quad (3.14)$$

où $\mathbf{w}_l = (\check{n}_l, \rho_l \check{\alpha}_l, \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_l, \rho_l \check{\alpha}_l \check{v}_l, \rho_l \check{\alpha}_l \check{w}_l, \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{\theta}_l, \rho_l \check{\alpha}_l \check{h}_{s,l})^T$ est le vecteur des variables conservatives mésoscopiques de la phase liquide avec $\check{u}_l, \check{v}_l$ et $\check{w}_l$ les trois composantes de la vitesse mésoscopique liquide : $\check{\mathbf{u}}_l = (\check{u}_l, \check{v}_l, \check{w}_l)^T$. $\mathbf{F}_l$ est le tenseur des flux de la phase liquide composé d'une partie dû à la convection par le mouvement mésoscopique $\mathbf{F}_l^M$ et d'une partie dûe au mouvement décorrélé $\mathbf{F}_l^U$:

$$\mathbf{F}_l = \mathbf{F}_l^M(\mathbf{w}_l) + \mathbf{F}_l^U(\mathbf{u}_p'') \quad (3.15)$$

Les tenseurs $\mathbf{F}_l^M$ et $\mathbf{F}_l^U$ s'écrivent respectivement :

$$\mathbf{F}_l^M = (\mathbf{f}_l^M, \mathbf{g}_l^M, \mathbf{h}_l^M)^T \quad (3.16)$$

$$\mathbf{F}_l^U = (\mathbf{f}_l^U, \mathbf{g}_l^U, \mathbf{h}_l^U)^T \quad (3.17)$$

Flux convectifs dûs au mouvement mésoscopique $\mathbf{F}_l^M$

Les trois composantes $\mathbf{f}_l^M$, $\mathbf{g}_l^M$ et $\mathbf{h}_l^M$ sont définies par :

$$\mathbf{f}_l^M = \begin{pmatrix} \check{n}_l \check{u}_l \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_l \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_l^2 \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_l \check{v}_l \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_l \check{w}_l \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_l \delta \check{\theta}_l \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_l \check{h}_{s,l} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{g}_l^M = \begin{pmatrix} \check{n}_l \check{v}_l \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{v}_l \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_l \check{v}_l \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{v}_l^2 \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{v}_l \check{w}_l \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{v}_l \delta \check{\theta}_l \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{v}_l \check{h}_{s,l} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{h}_l^M = \begin{pmatrix} \check{n}_l \check{w}_l \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{w}_l \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_l \check{w}_l \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{v}_l \check{w}_l \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{w}_l^2 \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{w}_l \delta \check{\theta}_l \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{w}_l \check{h}_{s,l} \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

⁸Cette hypothèse est raisonnable dans les configurations industrielles pour lesquelles les échanges thermiques sont très rapides. La levée de cette hypothèse dans des configurations académiques est néanmoins étudiée (Masi *et al.*, 2008).

Flux convectifs dûs au mouvement décorrélé $\mathbf{F}_l^U$

Les trois composantes du tenseur des flux du mouvement décorrélé $\mathbf{f}_l^U$, $\mathbf{g}_l^U$ et $\mathbf{h}_l^U$ sont :

$$\mathbf{f}_l^U = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{R}_{l,xx} \\ \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{R}_{l,xy} \\ \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{R}_{l,xz} \\ \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{S}_{l,iix} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{g}_l^U = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{R}_{l,xy} \\ \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{R}_{l,yy} \\ \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{R}_{l,yz} \\ \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{S}_{l,iyy} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{h}_l^U = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{R}_{l,xz} \\ \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{R}_{l,yz} \\ \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{R}_{l,zz} \\ \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{S}_{l,iiz} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

Termes sources $\mathbf{s}_l$

$\mathbf{s}_l$ est le vecteur des termes sources composé d'une partie liée aux échanges avec le gaz $\mathbf{s}_{g-l}$ et d'une partie liée au mouvement décorrélé $\mathbf{s}_\theta$:

$$\mathbf{s}_l = \mathbf{s}_{g-l} + \mathbf{s}_\theta \quad (3.20)$$

$\mathbf{s}_{g-l}$ regroupe les termes de transfert de masse, de quantité de mouvement et d'énergie avec la phase gazeuse :

$$\mathbf{s}_{g-l} = \begin{pmatrix} 0 \\ -\Gamma \\ -\Gamma \check{u}_l + F_{d,x} \\ -\Gamma \check{v}_l + F_{d,y} \\ -\Gamma \check{w}_l + F_{d,z} \\ -\Gamma \delta \check{\theta}_l + W_\theta \\ -\Gamma \check{h}_{s,l} + \Phi_l \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

$\mathbf{s}_\theta$ contient uniquement le terme additionnel couplant l'énergie décorrélé aux contraintes du mouvement mésoscopique qui apparaît dans l'équation de l'énergie décorrélée :

$$\mathbf{s}_\theta = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -\rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{R}_{l,ij} \frac{\partial}{\partial x_j} \check{u}_{l,i} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.22)$$

Les différentes composantes des vecteurs $\mathbf{F}_l^U$, $\mathbf{s}_{g-l}$ et $\mathbf{s}_\theta$ nécessitent des modèles de fermeture qui sont présentés dans la suite de cette section.

3.2.3 Traitement du couplage inverse entre les phases

Pour obtenir les termes d'échange *gaz-liquide* (couplage direct) qui composent $\mathbf{s}_{g-l}$, on a fait l'hypothèse que le filtrage statistique de la phase dispersée est basé sur une réalisation unique de la phase gazeuse (cf. section 3.2.1, **H7**). Or, chaque réalisation particulière introduit une perturbation de la phase gazeuse via ces échanges interfaciaux.

De façon rigoureuse, il faudrait recourir à la probabilité jointe fluide-particules pour définir la fonction densité de présence de particules (Février & Simonin, 2000). *A posteriori*, on peut considérer que la fonction densité de présence (définie à la section précédente) n'est pas conditionnée par une seule réalisation fluide, mais par l'ensemble des réalisations fluides perturbées qui aboutissent au champ filtré *perturbé* de la phase gazeuse.

Pour obtenir les termes de couplage entre les phases qui apparaissent dans les équations de la phase gazeuse, il faut écrire les bilans de masse, de quantité de mouvement et d'énergie totale du système *gaz+liquide*.

$$\mathbf{s}_{l-g} = \begin{pmatrix} \Gamma \check{u}_l - F_{d,x} \\ \Gamma \check{v}_l - F_{d,y} \\ \Gamma \check{w}_l - F_{d,z} \\ \Pi_g + \Gamma \frac{1}{2} \check{u}_{l,i}^2 - \check{u}_{l,i} F_{d,i} \\ \Gamma \delta_{k,F} \end{pmatrix} \quad (3.23)$$

$\Gamma \frac{1}{2} \check{u}_{l,i}^2$ et $-\check{u}_{l,i} F_{d,i}$ représentent respectivement les taux de transfert d'énergie cinétique gazeuse liés aux effets de l'évaporation et de la traînée. Π_g correspond au transfert d'énergie interne sensible par évaporation et par conduction thermique gaz-liquide, cf. section suivante.

3.2.4 Modèles de couplage entre les phases

Termes sources de traînée

1. Terme $\mathbf{F}_d$ dans l'équation de quantité de mouvement mésoscopique (Eq. (3.10), §-3.1.2)

Le transfert de quantité de mouvement $\mathbf{F}_d$ du liquide vers le gaz dû à la force de traînée $\mathbf{F}_p$ exercée sur chaque gouttelette, s'exprime comme une moyenne d'ensemble :

$$\mathbf{F}_d = \rho_l \check{\alpha}_l \left\langle \frac{\mathbf{F}_p}{m_p} \right\rangle_l \quad (3.24)$$

La force de traînée s'appliquant sur chaque gouttelette est modélisée par une loi de Stokes étendue par la corrélation de Schiller et Nauman valable pour les nombres de

Reynolds particulière Re_p inférieurs à 800 (Clift *et al.*, 1978).

$$\mathbf{F}_p = \frac{1}{2} C_D \rho \pi \frac{d^2}{4} (\mathbf{u} - \mathbf{c}_p) \cdot (\mathbf{u} - \mathbf{c}_p) \quad (3.25)$$

$$\text{avec } C_D = \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15 Re_p^{0.687})$$

$$\text{et } Re_p = \frac{\rho (\mathbf{u} - \check{\mathbf{u}}_l) d}{\mu} \quad (3.26)$$

En appliquant la moyenne d'ensemble, on écrit le terme source dûs à la traînée dans l'équation Eq. (3.10) selon :

$$\mathbf{F}_d = \frac{\rho_l \check{\alpha}_l}{\tau_p} (\mathbf{u} - \check{\mathbf{u}}_l) \quad (3.27)$$

$$\frac{1}{\tau_p} = \frac{1 + 0.15 Re_p^{0.687}}{\tau'_p} \quad \text{où } \tau'_p = \frac{\rho_l d^2}{18\mu}$$

2. Terme W_θ dans l'équation de l'énergie décorrélée (Eq. (3.11), §-3.1.2)

Par définition le mouvement décorrélé des particules subit également un effet des efforts de traînée. Le terme source W_θ dans l'équation de l'énergie décorrélée Eq. (3.11) se déduit de l'expression de la force de traînée exercée sur une particule :

$$W_\theta = \rho_l \check{\alpha}_l \left\langle \mathbf{u}_p'' \cdot \frac{\mathbf{F}_p}{m_p} \right\rangle_l = \frac{2 \rho_l \check{\alpha}_l}{\tau_p} \delta \check{\theta}_l \quad (3.28)$$

Termes sources d'évaporation

L'évaporation du carburant liquide dans AVBP est construite sur un modèle d'évaporation développé pour une goutte isolée. Sazhin (2006) dans sa revue classifie les modèles d'évaporation de gouttes isolées dans un gaz à température uniforme selon la modélisation de la conduction thermique dans la phase liquide et de la conduction thermique et du transfert massique dans la phase gazeuse. Le modèle utilisé dans AVBP selon cette classification correspond à un modèle à conduction infinie dans le liquide et un modèle à symétrie sphérique dans le gaz. L'approche est schématisée par le croquis de la Fig. 3.2, les variables à la surface de la goutte sont indicées ζ , les variables à l'infini de la surface de goutte (en pratique prise au noeud ou à la cellule de calcul) sont indicée l . Dans la goutte, la conduction thermique est supposée infiniment rapide par rapport à celle dans le gaz, ainsi la température de la goutte est uniforme. Dans le référentiel de la goutte, le gaz est supposé au repos (on suppose l'état gazeux *quasi-stationnaire*), ainsi le problème de transfert thermique et massique dans le gaz est un problème à symétrie sphérique qui ne dépend que de la coordonnée radiale qui mesure la distance à la surface de la goutte. Le lecteur pourra trouver sa résolution détaillée dans les ouvrages de Sirignano (1999) et Kuo (2005). Dans la suite, on se contente de donner l'ensemble des écritures mathématiques qui en découlent dans l'approche Eulérienne mésoscopique et qui sont codées dans AVBP.

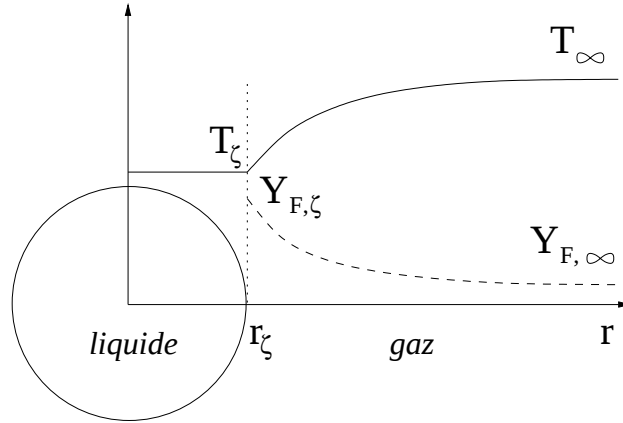


FIG. 3.2: Définition du problème de l'évaporation d'une goutte dans une atmosphère au repos.

1. Taux d'évaporation Γ (Eqs. (3.9-3.12), §-3.1.2)

Le terme de transfert de masse Γ du liquide vers le gaz s'exprime comme la moyenne d'ensemble de la variation de masse des gouttelettes, Eq. (3.29). Cette variation de masse est déterminée en résolvant le problème de l'évaporation d'une goutte isolée sans combustion au sein d'un écoulement gazeux.

$$\Gamma = -\rho_l \check{\alpha}_l \left\langle \frac{1}{m_p} \frac{dm_p}{dt} \right\rangle_l = -\check{n}_l \left\{ \frac{dm_p}{dt} \right\}_l \quad (3.29)$$

Le modèle d'évaporation employé suppose que l'interface est à l'équilibre thermodynamique et que la conductivité thermique est infinie pour le liquide. Ainsi on peut utiliser la loi de Clausius-Clapeyron pour relier la température uniforme $T_p = T_\zeta$ de la goutte à la fraction molaire de carburant vapeur à l'interface.

La résolution du problème de l'évaporation d'une goutte isolée est décrite dans les ouvrages de Kuo (2005) et Sirignano (1999). En intégrant l'équation de conservation de l'espèce évaporante entre l'interface de la goutte et une distance infinie de la goutte, en considérant la quantité $[\rho D_F]$ constante, la variation de masse d'une goutte isolée s'écrit :

$$\frac{dm_p}{dt} = -\pi d Sh [\rho D_F] \ln(1 + B_M) \quad (3.30)$$

La variation des propriétés thermodynamiques et de transport du gaz environnant la goutte isolée sont prises en compte en évaluant ces propriétés à une température T_{ref} et une composition $Y_{k,ref}$ de référence définies par la règle dite du *un-tiers deux-tiers*, Eqs. (3.31-3.33). Cette règle suppose que la couche de gaz autour de la goutte, et donc ses propriétés thermodynamiques et de transport, suit une évolution quasi-stationnaire. Cette hypothèse a été confirmée par l'étude de Hubbard *et al.*

(1975).

$$T_{ref} = \frac{1}{3}T_{\infty} + \frac{2}{3}T_{\zeta} \quad (3.31)$$

$$Y_{F,ref} = \frac{1}{3}Y_{F,\infty} + \frac{2}{3}Y_{F,\zeta} \quad (3.32)$$

$$Y_{k,ref} = Y_{k,\infty} \frac{1 - Y_{F,ref}}{1 - Y_{F,\infty}} \quad \text{pour } k = F \quad (3.33)$$

Ainsi le produit $[\rho D_F]$ est considéré constant entre la surface de la goutte et une distance infinie. Il est calculé à la température de référence. Le calcul de $[\rho D_F]$ dépend du choix de la modélisation employée pour le calcul des coefficients de transport. Au Chapitre 6, deux évaluations de ce terme sont comparées, l'une en utilisant une modélisation simplifiée basée sur un nombre de Schmidt constant du carburant, l'autre utilisant une modélisation issue de la théorie cinétique. La première évaluation est celle employée dans AVBP, le coefficient $[\rho D_F]$ s'écrit :

$$[\rho D_F] = \frac{\mu(T_{ref})}{Sc_F} \quad (3.34)$$

B_M est le nombre de Spalding de masse qui fait apparaître la différence de fraction massique de carburant gazeux entre l'interface et l'infini, il s'écrit :

$$B_M = \frac{Y_{F,\zeta} - Y_{F,\infty}}{1 - Y_{F,\zeta}} \quad (3.35)$$

$Y_{F,\zeta}$ peut s'écrire en fonction de la fraction molaire $X_{F,\zeta}$ selon l'Eq. (3.36) où $\bar{W}_{nF,\zeta}$ est la masse molaire moyenne du *pseudo*-mélange constitué de toutes les espèces autres que le carburant.

$$Y_{F,\zeta} = \frac{X_{F,\zeta} W_F}{X_{F,\zeta} W_F + (1 - X_{F,\zeta}) \bar{W}_{nF,\zeta}} \quad (3.36)$$

En supposant que la composition de ce mélange est la même entre ζ et ∞ , $\bar{W}_{nF,\zeta}$ s'écrit selon l'Eq. (3.37).

$$\bar{W}_{nF,\zeta} = \bar{W}_{nF,\infty} = \frac{1 - Y_{F,\infty}}{1 - Y_{F,\infty} \frac{W_F}{\bar{W}_F}} \bar{W} \quad (3.37)$$

$X_{F,\zeta}$ est fourni par la loi de Raoult pour un mélange idéal de gaz parfaits :

$$X_{F,\zeta} = \frac{P_{F,\zeta}}{P} \quad (3.38)$$

où $P_{F,\zeta}$ est la pression partielle de carburant gazeux à l'interface donnée par la relation de Clausius-Clapeyron :

$$P_{F,\zeta} = P_{cc} \exp \left(\frac{W_F L_v^*}{\mathcal{R}} \left(\frac{1}{T_{cc}} - \frac{1}{T_{\zeta}} \right) \right) \quad (3.39)$$

Le couple (P_{cc}, T_{cc}) correspond à un point sur la courbe de changement d'état liquide-vapeur dans le diagramme de phase (P,T). Ainsi P_{cc} correspond à la pression de

vapeur saturante du carburant à la température T_{cc} . La forme intégrée de la relation de Clausius-Clapeyron, donnée à l'Eq. (3.39), suppose que la chaleur latente massique de vaporisation L_v est constante entre les températures T_ζ et T_{cc} . Dans l'Eq. (3.39), L_v^* correspond à L_v prise à la température T_l^{ref} :

$$L_v^* = L_v \left(T_l^{ref} \right) = \Delta h_{s,F} \left(T_l^{ref} \right) \quad (3.40)$$

T_l^{ref} est la température de référence pour calculer l'enthalpie du liquide :

$$h_{s,l}(T) = C_{p,l} \left(T - T_l^{ref} \right) \quad (3.41)$$

Il faut noter que T_l^{ref} est différente de la température de référence du gaz. La température de référence pour les corps gazeux est 0 K. Pour le liquide typiquement la température de référence correspond à la température standard 298 K ou la température d'ébullition du corps à la pression standard 1 bar. Ainsi $L_v(T)$ étant la différence des enthalpies sensibles entre les phases, prises à la même température, un terme correctif apparaît :

$$L_v(T) = h_{s,F}(T) - h_{s,l}(T) - h_{s,corr} \left(0, T_l^{ref} \right) \quad (3.42)$$

où $h_{s,corr} \left(0, T_l^{ref} \right)$ est défini par :

$$h_{s,corr} \left(0, T_l^{ref} \right) = h_{s,F} \left(T_l^{ref} \right) - L_v^* \quad (3.43)$$

En appliquant la moyenne d'ensemble de l'Eq. (3.29), on obtient l'équation Eq. (3.44), avec B_M défini par l'Eq. (3.35), $[\rho D_F]$ par l'Eq. (3.34) et d extrait de l'Eq. (3.13).

$$\Gamma = \pi \check{n}_l d Sh [\rho D_F] \ln(1 + B_M) \quad (3.44)$$

2. Terme Π_g dans l'équation de l'énergie totale gazeuse (Eq. (3.23), §-3.2.3) et terme Φ_l dans l'équation de l'enthalpie liquide (Eq. (3.12), §-3.1.2).

Le transfert de chaleur du liquide vers le gaz Π_g s'exprime comme une moyenne d'ensemble du transfert d'enthalpie des gouttelettes selon l'Eq. (3.45). Le transfert de chaleur résultant du processus d'évaporation d'une goutte isolée sans combustion au sein d'un écoulement gazeux comporte deux contributions données par l'Eq. (3.46) : le flux de chaleur par conduction ϕ_g^c et le flux d'enthalpie par changement de phase ϕ_g^{ev} . On obtient ainsi l'Eq. (3.47) pour Π_g . Le terme de transfert de chaleur Π_l du gaz vers le liquide qui apparaît dans l'équation de conservation de l'enthalpie liquide Eq. (3.12) est égal à l'opposé du transfert de chaleur du liquide vers le gaz à la différence près de température de référence choisie pour les enthalpies gazeuse et

liquide qui fait apparaître le terme $h_{s,corr}(0, T_l^{ref})$, Eq. (3.48).

$$\Pi_g = \rho_l \check{\alpha}_l \left\langle \frac{\phi_g^t}{m_p} \right\rangle_l = \check{n}_l \{ \phi_g^t \}_l \quad (3.45)$$

$$\phi_g^t = \phi_g^c + \phi_g^{ev} \quad (3.46)$$

$$\Pi_g = \Phi_g + \Lambda_g \quad \text{avec } \Phi_g = \check{n}_l \{ \phi_g^c \}_l \text{ et } \Lambda_g = \check{n}_l \{ \phi_g^{ev} \}_l \quad (3.47)$$

$$\Pi_l = -\Pi_g + \Gamma h_{s,corr}(0, T_l^{ref}) \quad (3.48)$$

En se référant à la résolution du problème de l'évaporation pour une goutte isolée (Kuo, 2005; Sirignano, 1999), le bilan des flux thermiques à l'interface d'une goutte évaporante s'écrit selon l'Eq. (3.49), faisant apparaître le flux total de chaleur de la goutte ϕ_p^t qui se décompose également en une partie conductive ϕ_p^c et une partie liée au changement de phase ϕ_p^{ev} .

$$\phi_g^t + \phi_p^t = \phi_g^c + \phi_g^{ev} + \phi_p^c + \phi_p^{ev} = 0 \quad (3.49)$$

Les contributions des flux thermiques vers la phase gazeuse et vers la phase liquide sont schématisés Fig. 3.3.

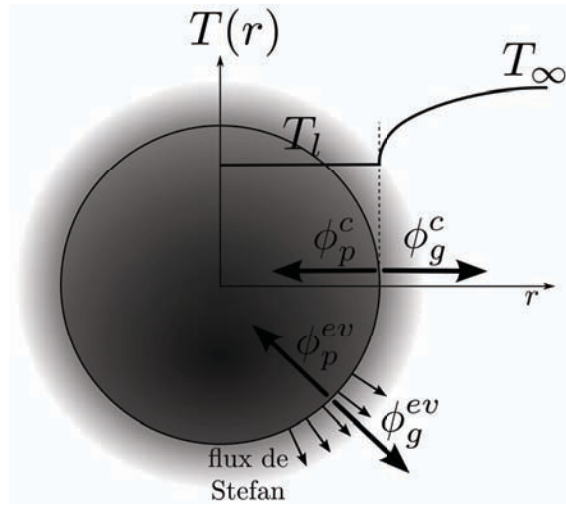


FIG. 3.3: Identification des flux thermiques ϕ_g^{ev} et ϕ_p^{ev} sont liés aux flux de masse (flux de Stefan), ϕ_g^c est lié au gradient de température entre la surface de la goutte et l'infini, ϕ_p^c est le flux de chaleur reçu par la goutte.

Les flux d'enthalpie par changement de phase de la goutte et du gaz environnant correspondent à la variation d'enthalpie de la phase liée exclusivement à la variation de masse :

$$\phi_g^{ev} = -\frac{dm_p}{dt} h_{s,F}(T_\zeta) \quad (3.50)$$

$$\phi_p^{ev} = \frac{dm_p}{dt} h_{s,l}(T_\zeta) \quad (3.51)$$

Ainsi la somme des flux d'enthalpie par changement de phase (Eq. (3.52)) d'une goutte isolée et du gaz environnant s'exprime en fonction de la chaleur latente de changement de phase L_v évaluée à la température de surface T_ζ (Eq. (3.42)) et du transfert de masse (Eq. (3.30)) :

$$\phi_p^{\text{ev}} + \phi_g^{\text{ev}} = -\frac{dm_p}{dt} L_v(T_\zeta) - \frac{dm_p}{dt} h_{s,\text{corr}}(0, T_l^{\text{ref}}) \quad (3.52)$$

En intégrant l'équation de conservation de l'enthalpie entre la surface de la goutte et une distance infinie de la goutte, on obtient une nouvelle expression de la variation de masse d'une goutte isolée Eq. (3.53), faisant intervenir le nombre de Spalding de température B_T défini par l'Eq. (3.54) dans laquelle L_{eff} est la chaleur latente effective de vaporisation (Sirignano, 1999).

$$\frac{dm_p}{dt} = -\pi d Nu \frac{\lambda}{C_p} \ln(1 + B_T) \quad (3.53)$$

$$B_T = \frac{\overline{C_p}(T_\infty - T_\zeta)}{L_{eff}} \quad \text{avec} \quad L_{eff} = L_v(T_\zeta) + \frac{\phi_p^c}{-\frac{dm_p}{dt}} \quad (3.54)$$

Comme décrit au paragraphe précédent, $\overline{C_p}$ et λ dans l'Eq. (3.53) sont évalués à la température et au mélange de référence Eqs. (3.31-3.33) et considérés constants entre la surface de la goutte et une distance infinie. De la même façon que le produit $[\rho D_F]$ l'évaluation de la conductivité thermique λ au point de référence dépend du choix de modélisation pour le calcul des coefficients de transport. Au Chapitre 6, deux évaluations sont comparées, l'une basée sur la théorie cinétique, l'autre sur le nombre de Prandtl du mélange constant. Cette dernière est la modélisation retenue dans AVBP:

$$\overline{C_p} = \sum_{k=1}^{N_s} Y_{k,\text{ref}} C_{p,k}(T_{\text{ref}}) \quad (3.55)$$

$$\lambda = \frac{\overline{C_p} \mu(T_{\text{ref}})}{Pr} \quad (3.56)$$

La consistance entre les équations Eq. (3.30) et Eq. (3.53) conduit à une relation entre les nombres de Spalding de masse et de température :

$$B_T = (1 + B_M)^\beta \quad \text{avec} \quad \beta = \frac{Sh}{Nu Le_F} \quad (3.57)$$

où Le_F correspond au nombre de Lewis du carburant dans le mélange considéré.

Finalement en combinant les équations Eq. (3.49) et Eqs. (3.52-3.54), le flux conductif dans le gaz s'écrit :

$$\phi_g^c = -\pi d Nu \lambda (T_\infty - T_\zeta) \frac{\ln(1 + B_T)}{B_T} \quad (3.58)$$

D'après l'hypothèse **H9**, en négligeant l'enthalpie décorrélée, les termes Φ_g et Λ_g de l'Eq. (3.47) s'expriment par :

$$\Phi_g = -\check{n}_l \pi d Nu \lambda (T_\infty - \check{T}_l) \frac{\ln(1 + B_T)}{B_T} \quad (3.59)$$

$$\Lambda_g = \Gamma h_{s,F}(\check{T}_l) \quad (3.60)$$

En notant $\Lambda_l = \check{n}_l \{ \phi_p^{\text{ev}} \}_l$ le transfert d'enthalpie liquide mésoscopique par changement de phase, en appliquant la moyenne d'ensemble à l'Eq. (3.52), et en négligeant l'enthalpie décorrélée, on obtient l'expression suivante :

$$\Lambda_l = -\Gamma h_{s,l}(\check{T}_l) = -\Gamma C_{p,l} (\check{T}_l - T_l^{\text{ref}}) \quad (3.61)$$

On peut alors définir un flux conductif mésoscopique pour le liquide Φ_l , tel que $\Pi_l = \Lambda_l + \Phi_l$. Étant donné que le liquide est supposé à conduction thermique infinie, le terme Φ_l , donné par l'Eq. (3.62), conduit en théorie à une évolution *instantanée* de la température du liquide $\check{T}_l$. En pratique cette évolution est effective sur un pas de temps.

$$\Phi_l = -\Pi_g + \Gamma \left(h_{s,l}(\check{T}_l) + h_{s,\text{corr}}(0, T_l^{\text{ref}}) \right) \quad (3.62)$$

Afin de prendre en compte l'effet favorisant de la convection du brouillard de gouttelettes sur l'évaporation, les nombres de Nusselt et Sherwood qui interviennent dans les expressions Eq. (3.44) et Eq. (3.59), sont corrigés par les corrélations de Frössling (1938).

$$Nu = 2 + 0.552 Re_p^{1/2} Pr^{1/3} \quad (3.63)$$

$$Sh = 2 + 0.552 Re_p^{1/2} Sc_F^{1/3} \quad (3.64)$$

3.2.5 Modèles de fermeture pour le mouvement décorrélé

Plusieurs modélisations du mouvement décorrélé ont été proposées par (Février & Simonin, 2000; Simonin *et al.*, 2002; Kaufmann *et al.*, 2008). Le choix pour AVBP s'est porté sur une fermeture par un modèle de viscosité pour le tenseur d'ordre 2 des vitesses décorrélées et un modèle de diffusivité pour le tenseur triple des vitesses décorrélées (Riber, 2007).

Terme source d'énergie décorrélée liée au mouvement mésoscopique

Le terme $-\rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{R}_{l,ij} \frac{\partial}{\partial x_j} \check{u}_{l,i}$ qui apparaît dans l'Eq. (3.11) au §-3.1.2 est un terme de production/destruction d'énergie décorrélée par le mouvement mésoscopique.

En formulant des hypothèses d'équilibre local et de faible anisotropie, on peut fermer la partie déviatorique du tenseur des contraintes d'ordre deux des vitesses décorrélées $\delta \check{R}_{l,ij} = \delta \check{R}_{l,ij}^* + \frac{2}{3} \delta \check{\theta}_l \delta_{ij}$ en appliquant un modèle de Boussinesq conduisant à un modèle de type visqueux (Simonin *et al.*, 2002) :

$$\delta \check{R}_{l,ij}^* = -\nu_{RUM} \underbrace{\left(\frac{\partial \check{u}_{l,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \check{u}_{l,j}}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \check{u}_{l,l}}{\partial x_l} \delta_{ij} \right)}_{\check{S}_{l,ij}^*} \quad \text{avec : } \nu_{RUM} = \frac{1}{3} \tau_p \delta \check{\theta}_l \quad (3.65)$$

Le terme source s'exprime en fonction de la partie déviatorique du tenseur des vitesses décorréliées et de l'énergie du mouvement décorrélé :

$$-\rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{R}_{l,ij} \frac{\partial}{\partial x_j} \check{u}_{l,i} = -\rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{R}_{l,ij}^* \frac{\partial \check{u}_{l,i}}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{\theta}_l \frac{\partial \check{u}_{l,j}}{\partial x_j} \quad (3.66)$$

Terme source dans l'équation de l'énergie décorrélée liée au mouvement décorrélé

Le terme $-\frac{\partial}{\partial x_j} \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{S}_{l,ij}$, qui apparaît dans l'Eq. (3.11) au §-3.1.2, correspond à l'advection de l'énergie décorrélée par le mouvement décorrélé. Ce flux s'exprime en fonction du tenseur d'ordre trois des vitesses décorréliées :

Le tenseur $\delta \check{S}_l$ est modélisé par une loi diffusive par analogie à une loi de Fourier pour la température (Kaufmann *et al.*, 2008) :

$$\delta \check{S}_{l,ij} = -\kappa_{RUM} \frac{\partial \delta \check{\theta}_l}{\partial x_j} \quad \text{avec : } \kappa_{RUM} = \frac{5}{3} \tau_p \delta \check{\theta}_l \quad (3.67)$$

3.3 Équations LES pour la phase dispersée

De la même manière que pour la phase gazeuse, les petites échelles de la phase liquide conduisent à des phénomènes de dissipation d'énergie dans l'écoulement (Boivin *et al.*, 2000). Ainsi on peut séparer les petites échelles qui ont un effet dissipatif universel, des grandes échelles qui répondent au forçage par la phase gazeuse porteuse.

3.3.1 Filtrage LES des équations de conservation

Le filtrage LES de la phase dispersée est analogue à celui de la phase gazeuse. La moyenne de Favre d'une fonction eulérienne mésoscopique $\check{f}_l$ de la phase dispersée est similaire à celle d'une fonction f de la phase gazeuse et s'obtient en remplaçant la masse volumique gazeuse ρ par la fraction volumique liquide mésoscopique $\check{\alpha}_l$ dans l'Eq. 2.36 :

$$\overline{\alpha_l \hat{f}_l} = \overline{\check{\alpha}_l \check{f}_l} \quad (3.68)$$

où $\overline{\alpha_l}$ est la fraction volumique de liquide filtrée au sens de la LES. Pour alléger les notations, on omet la notation $\check{}$ dans la mesure où le filtrage LES de la phase dispersée ne s'applique que sur des quantités initialement issues du filtrage statistique mésoscopique.

Afin d'avoir une équivalence entre la moyenne de Favre basée sur la fraction volumique et la densité de gouttes, on fait l'hypothèse que l'écoulement est monodisperse à l'échelle

de la taille du filtre. Cela revient à négliger les effets de variance de sous-maille du diamètre des gouttes : $\bar{d} \approx d$. On a alors :

$$\overline{\check{n}_l \check{f}_l} = \frac{\overline{6\check{\alpha}_l}}{\pi d^3} \check{f}_l = \frac{6}{\pi d^3} \bar{\alpha}_l \hat{f}_l = \bar{n}_l \hat{f}_l \quad (3.69)$$

où $\bar{n}_l$ est la densité de goutte filtrée.

En appliquant la procédure de filtrage aux équations de conservation eulériennes de la phase dispersée, on obtient les équations de conservation LES pour le spray :

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{w}}_l}{\partial t} + \bar{\mathbf{F}}_l = \bar{\mathbf{s}}_l \quad (3.70)$$

où $\bar{\mathbf{w}}_l = (\bar{n}_l, \rho_l \bar{\alpha}_l, \rho_l \bar{\alpha}_l u_l, \rho_l \bar{\alpha}_l v_l, \rho_l \bar{\alpha}_l w_l, \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{\delta}\theta_l, \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{h}_{s,l})^T$ est le vecteur des variables conservatives mésoscopiques de la phase liquide avec u_l, v_l et w_l les trois composantes de la vitesse mésoscopique liquide : $\hat{\mathbf{u}}_l = (u_l, v_l, w_l)^T$. $\bar{\mathbf{s}}_l$ est le terme source filtré et $\bar{\mathbf{F}}_l$ est le tenseur des flux filtrés composé de trois contributions :

$$\bar{\mathbf{F}}_l = \bar{\mathbf{F}}_l^M + \bar{\mathbf{F}}_l^U + \bar{\mathbf{F}}_l^t \quad (3.71)$$

avec

$$\text{tenseur des flux mésoscopiques résolus : } \bar{\mathbf{F}}_l^M = (\bar{\mathbf{f}}_l^M, \bar{\mathbf{g}}_l^M, \bar{\mathbf{h}}_l^M)^T \quad (3.72)$$

$$\text{tenseur des flux décorrélés résolus : } \bar{\mathbf{F}}_l^U = (\bar{\mathbf{f}}_l^U, \bar{\mathbf{g}}_l^U, \bar{\mathbf{h}}_l^U)^T \quad (3.73)$$

$$\text{tenseur des flux de sous-maille : } \bar{\mathbf{F}}_l^t = (\bar{\mathbf{f}}_l^t, \bar{\mathbf{g}}_l^t, \bar{\mathbf{h}}_l^t)^T \quad (3.74)$$

3.3.2 Flux mésoscopiques résolus

Les trois composantes du tenseur des flux mésoscopiques résolus $\bar{\mathbf{F}}_l^M$ sont définies par :

$$\bar{\mathbf{f}}_l^M = \begin{pmatrix} \bar{n}_l u_l \\ \rho_l \bar{\alpha}_l u_l \\ \rho_l \bar{\alpha}_l u_l^2 \\ \rho_l \bar{\alpha}_l u_l v_l \\ \rho_l \bar{\alpha}_l u_l w_l \\ \rho_l \bar{\alpha}_l u_l \hat{\delta}\theta_l \\ \rho_l \bar{\alpha}_l u_l \hat{h}_{s,l} \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{g}}_l^M = \begin{pmatrix} \bar{n}_l v_l \\ \rho_l \bar{\alpha}_l v_l \\ \rho_l \bar{\alpha}_l u_l v_l \\ \rho_l \bar{\alpha}_l v_l^2 \\ \rho_l \bar{\alpha}_l v_l w_l \\ \rho_l \bar{\alpha}_l v_l \hat{\delta}\theta_l \\ \rho_l \bar{\alpha}_l v_l \hat{h}_{s,l} \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{h}}_l^M = \begin{pmatrix} \bar{n}_l w_l \\ \rho_l \bar{\alpha}_l w_l \\ \rho_l \bar{\alpha}_l u_l w_l \\ \rho_l \bar{\alpha}_l v_l w_l \\ \rho_l \bar{\alpha}_l w_l^2 \\ \rho_l \bar{\alpha}_l w_l \hat{\delta}\theta_l \\ \rho_l \bar{\alpha}_l w_l \hat{h}_{s,l} \end{pmatrix} \quad (3.75)$$

3.3.3 Flux décorrélés résolus

Les trois composantes du tenseur des flux résolus du mouvement décorrélé $\bar{\mathbf{F}}_l^U$ sont définies par :

$$\bar{\mathbf{f}}_l^U = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \widehat{\delta R}_{l,xx} \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \widehat{\delta R}_{l,xy} \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \widehat{\delta R}_{l,xz} \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \widehat{\delta S}_{l,ii} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{g}}_l^U = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \widehat{\delta R}_{l,xy} \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \widehat{\delta R}_{l,yy} \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \widehat{\delta R}_{l,yz} \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \widehat{\delta S}_{l,iij} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{h}}_l^U = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \widehat{\delta R}_{l,xz} \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \widehat{\delta R}_{l,yz} \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \widehat{\delta R}_{l,zz} \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \widehat{\delta S}_{l,iiz} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.76)$$

3.3.4 Filtrage des termes non-linéaires

Pour les tenseurs $\widehat{\delta R}_l$ et $\widehat{\delta S}_l$, on utilise la décomposition (partie déviatorique + énergie décorrélée) et la fermeture proposées au §-3.2.5 en remplaçant les grandeurs non filtrées par les grandeurs filtrées :

$$\widehat{\delta R}_{l,ij} = \widehat{\delta R}_{l,ij}^* + \frac{2}{3} \widehat{\delta \theta}_l \delta_{ij} \quad (3.77)$$

$$\widehat{\delta R}_{l,ij}^* = -\widehat{\nu}_{RUM} \widehat{S}_{l,ij}^* \quad (3.78)$$

$$\widehat{\delta S}_{l,ij} = -\widehat{\kappa}_{RUM} \frac{\partial \widehat{\delta \theta}_l}{\partial x_j} \quad (3.79)$$

où $\widehat{S}_{l,ij}^*$ est la partie déviatorique du tenseur des contraintes résolues de la phase dispersée :

$$\widehat{S}_{l,ij}^* = \frac{\partial \widehat{u}_{l,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \widehat{u}_{l,j}}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \widehat{u}_{l,k}}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (3.80)$$

et $\widehat{\nu}_{RUM}$ et $\widehat{\kappa}_{RUM}$ s'expriment également en fonction des grandeurs filtrées :

$$\widehat{\nu}_{RUM} = \frac{1}{3} \bar{\tau}_p \widehat{\delta \theta}_l \quad (3.81)$$

$$\widehat{\kappa}_{RUM} = \frac{5}{3} \bar{\tau}_p \widehat{\delta \theta}_l \quad (3.82)$$

où le temps de relaxation filtré $\bar{\tau}_p$ est obtenu via l'approximation suivante :

$$\bar{\tau}_p \approx \left(1 + 0.15 \overline{Re}_p^{0.687}\right) \frac{\rho_l d^2}{18 \bar{\mu}} \quad (3.83)$$

$$\text{avec : } \overline{Re}_p \approx \frac{\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} - \widehat{\mathbf{u}}_l d}{\bar{\mu}} \quad (3.84)$$

3.3.5 Flux de sous-maille

Les trois composantes du tenseur de sous-maille $\bar{\mathbf{F}}_l^t$ s'écrivent :

$$\bar{\mathbf{f}}_l^t = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\bar{\tau}_{l,xx}^t \\ -\bar{\tau}_{l,xy}^t \\ -\bar{\tau}_{l,xz}^t \\ \bar{q}_{\theta,x}^t \\ \bar{q}_{h,x}^t \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{g}}_l^t = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\bar{\tau}_{l,xy}^t \\ -\bar{\tau}_{l,yy}^t \\ -\bar{\tau}_{l,yz}^t \\ \bar{q}_{\theta,y}^t \\ \bar{q}_{h,y}^t \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{h}}_l^t = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\bar{\tau}_{l,xz}^t \\ -\bar{\tau}_{l,yz}^t \\ -\bar{\tau}_{l,zz}^t \\ \bar{q}_{\theta,z}^t \\ \bar{q}_{h,z}^t \end{pmatrix} \quad (3.85)$$

Tenseur des contraintes de sous-maille de la phase dispersée $\bar{\tau}_{l,ij}^t$

Moreau (2006) a montré que la modélisation du mouvement *mésoscopique* de sous-maille de la phase dispersée nécessite de prendre en compte les effets de compressibilité en modélisant d'une part la partie déviatorique du tenseur et d'autre part la partie sphérique. Le choix du modèle de sous-maille a fait l'objet de l'étude de Moreau *et al.* (2009). Parmi les modèles évalués, Riber (2007) a retenu pour intégration dans AVBP un modèle de Smagorinsky pour la partie déviatorique du tenseur et un modèle de Yoshizawa pour la partie sphérique liée à la compressibilité de la phase.

$$\bar{\tau}_{l,ij}^t = -\rho_l \bar{\alpha}_l (\widehat{u_{l,i} u_{l,j}} - \hat{u}_{l,i} \hat{u}_{l,j}) \quad (3.86)$$

$$\text{modèle : } \bar{\tau}_{l,ij}^t = \rho_l \bar{\alpha}_l \nu_{l,t}^d \widehat{S_{l,ij}^*} - \frac{2}{3} \rho_l \bar{\alpha}_l \nu_{l,t}^s |\widehat{S_l^*}| \delta_{ij} \quad (3.87)$$

Cette modélisation introduit deux viscosités de sous-maille pour la phase dispersée, $\nu_{l,t}^s$ et $\nu_{l,t}^d$, pour chaque partie du tenseur modélisée.

$$\nu_{l,t}^d = C_S'^2 \Delta^2 |\widehat{S_l^*}| \quad \text{avec : } C_S' = 0.12 \quad (3.88)$$

$$\nu_{l,t}^s = C_Y' \Delta^2 |\widehat{S_l^*}| \quad \text{avec : } C_Y' = 0.025 \quad (3.89)$$

Diffusion de sous-maille de l'énergie décorrélée $\bar{q}_{\theta,i}^t$

$\bar{q}_{\theta}^t$ est le flux de sous-maille de l'énergie décorrélée. Par analogie avec la modélisation du terme de sous-maille de flux de chaleur, un nombre de Prandtl turbulent pour la phase dispersée Pr_l^t est introduit pour modéliser la diffusion de sous-maille de l'énergie décorrélée filtrée :

$$\bar{q}_{\theta,i}^t = \rho_l \bar{\alpha}_l (\widehat{u_{l,i} \delta \theta_l} - \hat{u}_{l,i} \hat{\delta \theta}_l) \quad (3.90)$$

$$\text{modèle : } \bar{q}_{\theta,i}^t = 2 \rho_l \bar{\alpha}_l \frac{\nu_{l,t}^d}{Pr_l^t} \frac{\partial \hat{\delta \theta}_l}{\partial x_i} \quad (3.91)$$

Dans les simulations présentées dans ce manuscrit le nombre Pr_l^t a été fixé à 0.7.

Diffusion de sous-maille de l'enthalpie sensible $\bar{q}_{h,i}^t$

$\bar{q}_h^t$ est le flux de sous-maille de l'enthalpie sensible liquide, dont les effets sont supposés négligeables. Il s'écrit :

$$\bar{q}_{h,i}^t = \rho_l \bar{\alpha}_l \left(\widehat{u_{l,i} h_{s,l}} - \widehat{u_{l,i}} \widehat{h_{s,l}} \right) \quad (3.92)$$

$$\text{modèle : } \bar{q}_{h,i}^t = 0 \quad (3.93)$$

3.3.6 Termes sources d'énergie décorrélée résolue

$\bar{s}_\theta$ est défini par :

$$\bar{s}_\theta = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{-\rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{R}_{l,ij} \frac{\partial}{\partial x_j} \check{u}_{l,i}}{0} \end{pmatrix} \quad (3.94)$$

où le terme filtré de production d'énergie décorrélée par le tenseur des vitesses décorrélées s'écrit :

$$\overline{-\rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{R}_{l,ij} \frac{\partial}{\partial x_j} \check{u}_{l,i}} = -\rho_l \bar{\alpha}_l \widehat{\delta R}_{l,ij} \frac{\partial \widehat{u}_{l,i}}{\partial x_j} - \underbrace{\left[\overline{\rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{R}_{l,ij} \frac{\partial \check{u}_{l,i}}{\partial x_j}} - \rho_l \bar{\alpha}_l \widehat{\delta R}_{l,ij} \frac{\partial \widehat{u}_{l,i}}{\partial x_j} \right]}_{\bar{\mathbb{U}}_\theta^t} \quad (3.95)$$

Le terme $\widehat{\delta R}_{l,ij}$ est estimé par la procédure donnée au §-3.3.4. Le terme $\bar{\mathbb{U}}_\theta^t$ est un terme de production par le mouvement de sous-maille. Il agit comme un terme de dissipation dans l'équation d'énergie corrélée de sous-maille. À partir d'une hypothèse d'équilibre sur l'énergie corrélée de sous-maille (Riber, 2007), on modélise $\bar{\mathbb{U}}_\theta^t$ de la façon suivante :

$$\bar{\mathbb{U}}_\theta^t = \overline{\rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{R}_{l,ij} \frac{\partial \check{u}_{l,i}}{\partial x_j}} - \rho_l \bar{\alpha}_l \widehat{\delta R}_{l,ij} \frac{\partial \widehat{u}_{l,i}}{\partial x_j} \quad (3.96)$$

$$\text{modèle : } \bar{\mathbb{U}}_\theta^t = \bar{\tau}_{l,ij}^t \frac{\partial \widehat{u}_{l,i}}{\partial x_j} \quad (3.97)$$

3.3.7 Termes sources de couplage pour les variables résolues

Le tenseur des échanges filtrés avec la phase gazeuse $\bar{\mathbf{s}}_{g-l}$ s'écrit :

$$\bar{\mathbf{s}}_{g-l} = \begin{pmatrix} 0 \\ -\bar{\Gamma} \\ -\overline{\Gamma\check{u}_l + F_{d,x}} \\ -\overline{\Gamma\check{v}_l + F_{d,y}} \\ -\overline{\Gamma\check{w}_l + F_{d,z}} \\ -\overline{\Gamma\delta\check{\theta}_l + \bar{W}_\theta} \\ -\overline{\Gamma\check{h}_{s,l} + \bar{\Phi}_l} \end{pmatrix} \quad (3.98)$$

Filtrage des termes sources de traînée

1. Taux de variation de quantité de mouvement par la traînée $\bar{\mathbf{F}}_d$

Le taux de variation de quantité de mouvement filtré est évalué à partir des quantités filtrées :

$$\bar{F}_{d,i} = \overline{\frac{\rho_l \bar{\alpha}_l}{\tau_p} (u_i - \check{u}_{l,i})} \quad (3.99)$$

$$\text{approximation : } \bar{F}_{d,i} \approx \frac{\rho_l \bar{\alpha}_l}{\bar{\tau}_p} (\tilde{u}_i - \hat{u}_{l,i}) \quad (3.100)$$

2. Taux de variation (destruction) d'énergie décorrélée par la traînée $\bar{W}_\theta$

$$\bar{W}_\theta = -\overline{\left(\frac{2\rho_l \bar{\alpha}_l}{\tau_p} \delta\check{\theta}_l \right)} \quad (3.101)$$

$$\text{approximation : } \bar{W}_\theta \approx -\frac{2\rho_l \bar{\alpha}_l}{\bar{\tau}_p} \hat{\delta\theta}_l \quad (3.102)$$

Filtrage des termes sources d'évaporation

1. Taux d'évaporation $\bar{\Gamma}$

Le taux d'évaporation filtré est construit à partir des grandeurs résolues :

$$\bar{\Gamma} = \overline{\pi \check{n}_l d Sh [\rho D_F] \ln(1 + B_M)} \quad (3.103)$$

$$\text{approximation : } \bar{\Gamma} \approx \pi \bar{n}_l d \bar{Sh} \frac{\bar{\mu}}{S_{CF}} \ln(1 + \bar{B}_M) \quad (3.104)$$

$$\text{avec : } \bar{Sh} \approx 2 + 0.55 \bar{Re}_p^{1/2} S_{CF}^{1/3} \quad (3.105)$$

$$\bar{B}_M \approx \frac{Y_{F,\zeta}(\hat{T}_l) - \tilde{Y}_F}{1 - Y_{F,\zeta}(\hat{T}_l)} \quad (3.106)$$

La validité de l'approximation de l'Eq. (3.104) a été vérifiée dans les travaux de Boileau (2007) sur un cas de turbulence homogène isotrope chargée en gouttelettes évaporantes.

2. Taux filtrés de variations de quantité de mouvement, d'énergie décorrélée et d'enthalpie par évaporation

Les taux de variations filtrés sont estimés comme le produit du taux d'évaporation filtré défini à l'Eq. (3.104) et de la grandeur résolue :

$$\overline{\Gamma \check{u}_{l,i}} \approx \bar{\Gamma} \hat{u}_{l,i} \quad (3.107)$$

$$\overline{\Gamma \delta \check{\theta}_l} \approx \bar{\Gamma} \hat{\delta \theta}_l \quad (3.108)$$

$$\overline{\Gamma \check{h}_{s,l}} \approx \bar{\Gamma} \hat{h}_{s,l} \quad (3.109)$$

$$(3.110)$$

3. Flux conductif d'enthalpie filtré $\bar{\Phi}_l$

Le flux conductif filtré est construit à partir de l'expression Eq. (3.62), de grandeurs résolues et du taux d'évaporation filtré estimé selon Eq. (3.104) :

$$\bar{\Phi}_l = -\bar{\Pi}_g + \overline{\Gamma \left(h_{s,l}(\check{T}_l) + h_{s,corr}(0, T_l^{ref}) \right)} \quad (3.111)$$

$$\approx -\bar{\Pi}_g + \bar{\Gamma} \left(\hat{h}_{s,l} + h_{s,corr}(0, T_l^{ref}) \right) \quad (3.112)$$

De la même manière le taux filtré d'échange d'enthalpie dans le sens *liquide* – *gaz* $\bar{\Pi}_g$ est estimé par :

$$\bar{\Pi}_g = \bar{\Lambda}_g + \bar{\Phi}_g \quad (3.113)$$

$$= \overline{\Gamma h_{s,F}(\check{T}_l)} - \check{n}_l \pi d Nu \lambda \left(T_\infty - \check{T}_l \right) \frac{\ln(1 + \bar{B}_T)}{\bar{B}_T} \quad (3.114)$$

$$\approx \bar{\Gamma} h_{s,F}(\hat{T}_l) - \bar{n}_l \pi d \bar{Nu} \bar{\lambda} \left(\tilde{T} - \hat{T}_l \right) \frac{\ln(1 + \bar{B}_T)}{\bar{B}_T} \quad (3.115)$$

On obtient finalement :

$$\bar{\Phi}_l \approx -\bar{\Gamma} L_v \left(\hat{T}_l \right) + \bar{n}_l \pi d \bar{Nu} \bar{\lambda} \left(\tilde{T} - \hat{T}_l \right) \frac{\ln(1 + \bar{B}_T)}{\bar{B}_T} \quad (3.116)$$

$$\text{avec : } \bar{Nu} \approx 2 + 0.55 \bar{Re}_p^{1/2} Pr^{1/3} \quad (3.117)$$

$$\bar{B}_T \approx (1 + \bar{B}_M)^{\bar{\beta}} \quad \text{avec : } \bar{\beta} = \frac{\bar{Sh}}{\bar{Nu} Le_F} \quad (3.118)$$

où L_v est la chaleur latente défini par l'Eq. (3.42) et $\bar{\lambda}$ par l'Eq. (2.54).

3.3.8 Termes sources de couplage inverse des équations filtrés

On applique le filtrage spatial aux termes d'échanges *liquide* – *gaz* donnés à l'Eq. (3.23).

$$\bar{s}_{l-g} = \begin{pmatrix} \overline{\Gamma \check{u}_l} - \overline{F_{d,x}} \\ \overline{\Gamma \check{u}_l} - \overline{F_{d,y}} \\ \overline{\Gamma \check{u}_l} - \overline{F_{d,z}} \\ \bar{\Pi}_g + \overline{\Gamma \frac{1}{2} \check{u}_{l,i}^2} - \check{u}_{l,i} \overline{F_{d,i}} \\ \bar{\Gamma} \delta_{k,F} \end{pmatrix} \quad (3.119)$$

En utilisant les mêmes approximations que celles faites au paragraphe précédent, on obtient :

$$\bar{\mathbf{s}}_{l-g} = \begin{pmatrix} \overline{\Gamma \hat{u}_l - F_{d,x}} \\ \overline{\Gamma \hat{v}_l - F_{d,y}} \\ \overline{\Gamma \hat{w}_l - F_{d,z}} \\ \overline{\Pi_g + \Gamma \frac{1}{2} \check{u}_{l,i}^2 - \check{u}_{l,i} F_{d,i}} \\ \overline{\Gamma \delta_{k,F}} \end{pmatrix} \quad (3.120)$$

Le terme $\overline{\check{u}_{l,i}^2}$ s'exprime en fonction du tenseur de sous-maille. Le terme de transfert d'énergie cinétique de sous-maille est négligé.

$$\overline{\check{u}_{l,i}^2} = \frac{-\overline{\tau}_{l,ii}^t}{\rho_l \alpha_l} + \overline{\hat{u}_{l,i}^2} \quad (3.121)$$

$$approximation : \quad \approx \overline{\hat{u}_{l,i}^2} \quad (3.122)$$

Le terme $\overline{\check{u}_{l,i} F_{d,i}}$ est calculé comme le produit de la vitesse mésoscopique résolue et de la force de traînée filtrée donnée à l'Eq. (3.100).

Finalement les termes de couplages inverses s'écrivent en LES :

$$\bar{\mathbf{s}}_{l-g} = \begin{pmatrix} \overline{\Gamma \hat{u}_l - F_{d,x}} \\ \overline{\Gamma \hat{v}_l - F_{d,y}} \\ \overline{\Gamma \hat{w}_l - F_{d,z}} \\ \overline{\Pi_g + \Gamma \frac{1}{2} \hat{u}_{l,i}^2 - \hat{u}_{l,i} \overline{F_{d,i}}} \\ \overline{\Gamma \delta_{k,F}} \end{pmatrix} \quad (3.123)$$

	DNS	LES
traînée	$F_{d,i} = \frac{\rho_l \check{\alpha}_l}{\tau_p} (\check{u}_{l,i} - u)$ $W_\theta = \frac{2\rho_l \check{\alpha}_l}{\tau_p} \delta \check{\theta}_l$	$\overline{F_{d,i}} = \frac{\rho_l \bar{\alpha}_l}{\bar{\tau}_p} (\check{u}_i - \hat{u}_{l,i})$ $\overline{W_\theta} = -\frac{2\rho_l \bar{\alpha}_l}{\bar{\tau}_p} \hat{\delta \theta}_l$
évaporation	$\Gamma = \pi \check{n}_l d Sh [\rho D_F] \ln(1 + B_M)$ $\Phi_g = -\check{n}_l \pi d Nu \lambda \left(T_\infty - \check{T}_l \right) \frac{\ln(1+B_T)}{B_T}$	$\bar{\Gamma} = \pi \bar{n}_l d \bar{Sh} \frac{\bar{\mu}}{\bar{S}_{cF}} \ln(1 + \bar{B}_M)$ $\overline{\Phi_g} = \bar{n}_l \pi d \bar{Nu} \bar{\lambda} \left(\bar{T} - \hat{T}_l \right) \frac{\ln(1+\bar{B}_T)}{\bar{B}_T}$
pression exercée par le mouvement décorrélé	$P_{RUE} = \frac{2}{3} \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{\theta}_l$	$\overline{P_{RUE}} = \frac{2}{3} \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{\delta \theta}_l$
production d'énergie décorrélée par le mouvement corrélé	$-\rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{R}_{l,ij}^* \frac{\partial \check{u}_{l,i}}{\partial x_j} = \rho_l \check{\alpha}_l \nu_{RUM} \check{S}_{l,ij}^* \frac{\partial \check{u}_{l,i}}{\partial x_j}$ avec : $\nu_{RUM} = \frac{1}{3} \tau_p \delta \check{\theta}_l$	$-\overline{\rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{R}_{l,ij}^* \frac{\partial \check{u}_{l,i}}{\partial x_j}} = \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{\nu}_{RUM} \hat{S}_{l,ij}^* \frac{\partial \hat{u}_{l,i}}{\partial x_j} - \bar{\tau}_{l,ij}^t \frac{\partial \hat{u}_{l,i}}{\partial x_j}$ avec : $\hat{\nu}_{RUM} = \frac{1}{3} \bar{\tau}_p \hat{\delta \theta}_l$
diffusion d'énergie décorrélée	$-\rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{S}_{l,ij} = \rho_l \check{\alpha}_l \kappa_{RUM} \frac{\partial \delta \check{\theta}_l}{\partial x_j}$ avec : $\kappa_{RUM} = \frac{5}{3} \tau_p \delta \check{\theta}_l$	$-\overline{\rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{S}_{l,ij}} = \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{\kappa}_{RUM} \frac{\partial \hat{\delta \theta}_l}{\partial x_j}$ avec : $\hat{\kappa}_{RUM} = \frac{5}{3} \bar{\tau}_p \hat{\delta \theta}_l$
flux de sous-maille de quantité de mouvement		$\bar{\tau}_{l,ij}^t = \rho_l \bar{\alpha}_l \nu_{l,t}^d \hat{S}_{l,ij}^* - \frac{2}{3} \rho_l \bar{\alpha}_l \nu_{l,t}^s \left \hat{S}_l^* \right \delta_{ij}$ avec : $\nu_{l,t}^d = C'_S \Delta^2 \left \hat{S}_l^* \right $ et : $C'_S = 0.12$ et : $\nu_{l,t}^s = C'_Y \Delta^2 \left \hat{S}_l^* \right $ et : $C'_Y = 0.025$
flux de sous-maille de d'énergie décorrélée		$\bar{q}_{\theta,i}^t = 2 \rho_l \bar{\alpha}_l \frac{\nu_{l,t}^d}{Pr_l^t} \frac{\partial \hat{\delta \theta}_l}{\partial x_i}$ avec : $Pr_l^t = 0.7$
flux de sous-maille d'enthalpie		$\bar{q}_{h,i}^t = 0$

TAB. 3.1: Récapitulatif des modélisations retenues dans les équations de la phase dispersée.

Deuxième partie

Approche numérique pour la
méthode Euler-Euler

Introduction

Un aperçu général des méthodes numériques et des conditions aux limites d'AVBP sont présentées de manière succincte au Chapitre 4. Une étude détaillée portant sur les stratégies numériques mises en oeuvre dans cette thèse pour le traitement de la phase liquide est réalisée au Chapitre 5. Il est intéressant de comprendre le fonctionnement des schémas numériques employés pour la convection et l'effet des opérateurs de diffusion artificielle sur des cas tests simples mono-dimensionnels. Ces stratégies seront mises en oeuvre et comparées sur la configuration MERCATO présentée dans la dernière partie de ce manuscrit.

Chapitre 4

Approche numérique dans AVBP

Sommaire

4.1 Introduction	75
4.2 Parallélisme et méthodes numériques	75
4.3 Conditions aux limites	79

4.1 Introduction

Ce chapitre résume de façon succincte les méthodes numériques employées pour les calculs réalisés avec AVBP et dont les résultats sont présentés dans cette thèse. Pour plus d'informations, l'ensemble des méthodes numériques implantées dans AVBP sont également décrites dans le manuel utilisateur disponible en ligne (Gicquel, 2008) et analysées au Chapitre 4 de la thèse de Lamarque (2007).

4.2 Parallélisme et méthodes numériques

Les résultats obtenus par simulation aux grandes échelles sont très dépendants de la précision du schéma numérique employé. En effet les structures turbulentes résolues ne doivent être ni dissipées, ni déformées par les erreurs numériques liées à la résolution spatiale (discrétisation) et temporelle (avancement) du calcul. D'autre part il faut garder en tête que la LES, parce qu'elle résout les grandes structures turbulentes en temps et en espace, reste une méthode très coûteuse en temps de calcul. Ainsi AVBP a été développé pour être employé sur des calculateurs à architecture massivement parallèle.

AVBP utilise des maillages non-structurés qui permettent de raffiner localement les mailles de la grille de calcul dans des géométries complexes. La Figure 4.1 donne une idée de la topologie des maillages hybrides qui peuvent être nécessaires pour une configuration

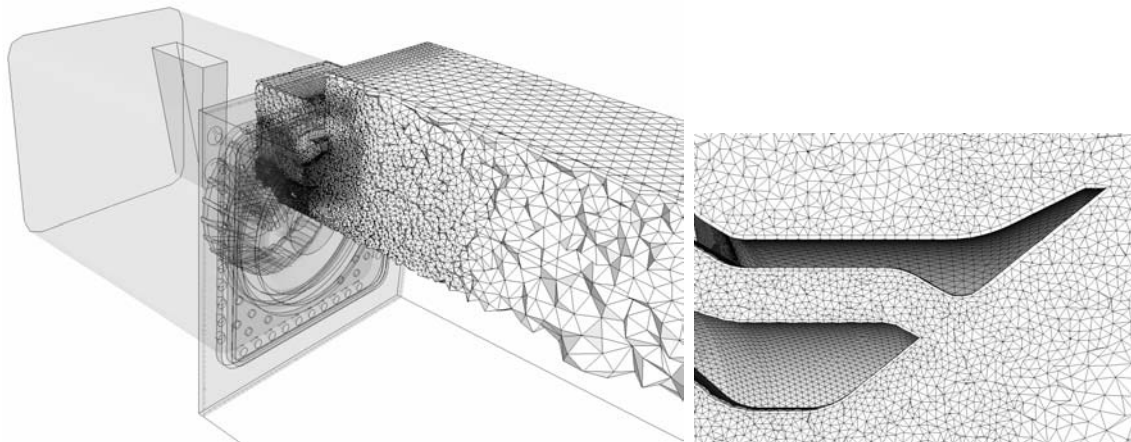


FIG. 4.1: Vues du maillage hybride sur la configuration TLC, réalisé par Jaegle (2009)

complexe. Le maillage non-structuré est découpé (on parle de partition de maillage) par le processus *maître*. L'algorithme MPL est utilisé pour optimiser ce découpage (García, 2009). Le processus *maître* distribue ensuite les différentes partitions aux différents processus *esclaves*. La bibliothèque MPI est utilisée pour gérer efficacement les communications entre processus. Les méthodes numériques employées dans AVBP sont principalement sélectionnées pour leur efficacité en temps de calcul et leur niveau de précision.

Le code AVBP est un solveur utilisant une formulation spatiale dite *cell-vertex* (pour discrétisation cellule-sommet). Les inconnues sont stockées aux noeuds du maillage et les bilans de conservation sont établis aux cellules primaires du calcul. Les résidus sont ensuite redistribués aux noeuds du maillage pour avancer le vecteur de variables. Cette discrétisation est très adaptée au parallélisme du code puisqu'elle limite les passages d'information entre les blocs de maillage. La pondération des résidus doit assurer une bonne précision même sur des maillages irréguliers (Lamarque, 2007).

Les développeurs d'AVBP ont fait le choix d'une intégration temporelle *explicite*, ce qui assure une parallélisation du code plus aisée. La stabilité des schémas de convection est alors assurée par la condition CFL. Dans sa thèse, Lamarque (2007) a calculé le nombre CFL critique pour l'ensemble des schémas disponibles dans AVBP par une analyse mono-dimensionnelle de stabilité. Les nombres CFL critiques pour les deux schémas employés dans les simulations de ces travaux de thèse sont donnés au tableau Tab. 4.1. De manière à s'assurer que le calcul tridimensionnel est bien dans le domaine de stabilité, le pas de temps de l'avancement du schéma numérique est choisi pour qu'en tout point du calcul le nombre CFL local soit inférieur à 0.7.

Schéma	Nombre CFL critique
LW	1
TTGC	1.022

TAB. 4.1: Domaine de stabilité des schémas utilisés pour les calculs mono-dimensionnels.

Plusieurs schémas numériques de convection sont implantés dans AVBP. Les calculs présentés et analysés dans cette thèse sont réalisés principalement avec le schéma centré éléments-finis TTGC (Colin & Rudgyard, 2000). Ce schéma est précis à l'ordre 3 en temps et en espace. L'intégration temporelle est réalisée en deux étapes par une méthode de prédiction-correction. Ce schéma a été spécialement développé pour AVBP et permet d'assurer une bonne précision sur les maillages non-structurés, pour tout type d'éléments (tétraèdres, hexaèdres, pyramides, prismes, ...) et pour un coût en temps de calcul raisonnable comparativement à d'autres schémas de même précision (Colin & Rudgyard, 2000). Afin d'évaluer l'utilisation de schémas décentrés pour la résolution du système d'équations de la phase liquide, le schéma PSI a également été employé (cf. Chapitre 5). Ce schéma est utilisé conjointement au schéma Lax-Wendroff (LW) pour la phase gazeuse. Ces deux schémas réalisent l'avancement temporel en une seule étape. Le schéma LW est un schéma centré précis à l'ordre 2 en temps et en espace, tandis que le schéma PSI est un schéma décentré précis à l'ordre 1 en temps et en espace. Cette stratégie numérique est encore en phase d'évaluation, et son utilisation sur la configuration MERCATO a permis une mesure quantitative des performances de ce schéma.

Deux formulations pour la discrétisation des termes de diffusion sont implantées dans AVBP. La première dérive de la discrétisation *cell-vertex* et conduit alors à un opérateur de diffusion dont le *stencil* est de 4Δ . Cela signifie que la construction de l'opérateur en un noeud du maillage nécessite l'information des noeuds adjacents et des noeuds adjacents à ces premiers. Ceci est résumé par le croquis sur la Fig. 4.2(a), le calcul de l'opérateur de diffusion sur le noeud central nécessite la connaissance de l'information aux noeuds des deux couronnes de cellules représentées. La seconde formulation dérive d'une méthode éléments-finis et conduit à une discrétisation *vertex-centered*¹ et à un *stencil* plus réduit de 2Δ . Pour calculer l'opérateur de diffusion en un noeud du maillage, cet opérateur n'utilise l'information que des noeuds des cellules adjacentes au noeud considéré, comme cela est représenté sur la Fig. 4.2(a). Les calculs présentés dans cette thèse utilisent la discrétisation 2Δ . En effet cet opérateur de diffusion permet de dissiper toutes les échelles énergétiques résolues sur la grille de calcul. En particulier, il agit comme un filtre sur les plus hautes fréquences, appelées *wiggles*, qui sont des oscillations numériques noeud à noeud (longueur d'onde 2Δ). Cet opérateur, déjà implanté pour les termes diffusifs (termes de dissipation laminaire et turbulent) de la phase gazeuse, a récemment été codé dans AVBP pour les termes dissipatifs des modèles de fermeture du mouvement décorrélé, et des termes de sous-maille, pour la phase liquide par Martinez (2009). Cette discrétisation est cruciale pour permettre de résoudre l'équation de l'énergie décorrélée dans des configurations complexes.

Les termes sources de couplage entre les phases peuvent être calculés directement aux noeuds pour avancer directement le vecteur des variables. Néanmoins, Lamarque (2007) rappelle la formulation *cell-vertex* exacte. Elle consiste à calculer le terme source au centre des cellules puis de le redistribuer au noeud. Cette formulation, plus précise, a été implantée et utilisée dans les calculs présentés dans cette thèse.

Le schéma de convection TTGC est centré en espace. Il est également très peu dissipatif. Il génère par contre des oscillations hautes fréquences ou *wiggles* dans les zones de forts gradients. Dans le cas du transport des variables gazeuses, l'opérateur de diffusion n'est

¹Pour discrétisation centrée aux sommets.

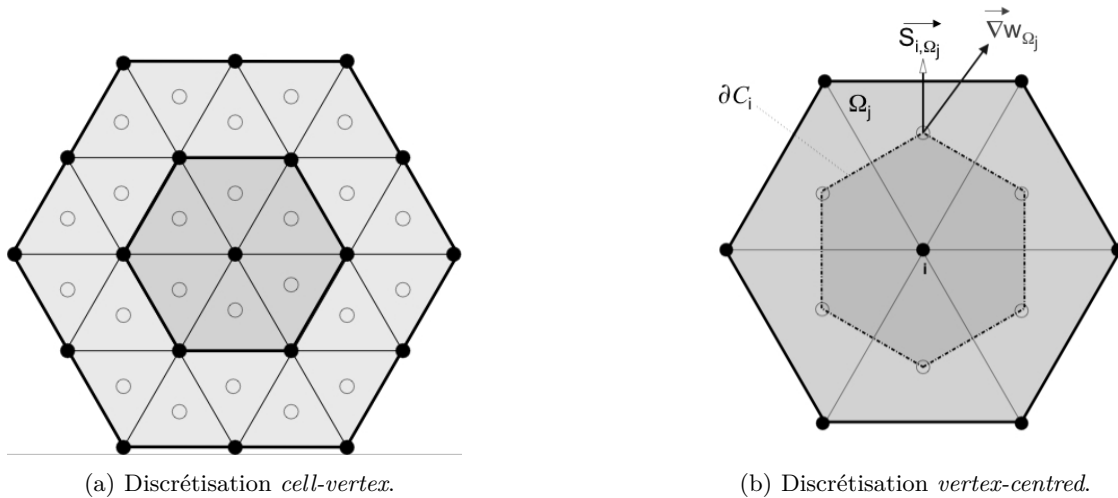


FIG. 4.2: Représentation des noeuds dont l'information est nécessaire pour calculer l'opérateur de diffusion (Laplacien).

parfois pas suffisant pour les dissiper complètement. Dans le cas du transport des variables de la phase liquide, il n'y a pas de termes de diffusion². L'emploi de diffusion artificielle, ou viscosité artificielle, permet de limiter efficacement l'effet dispersif des schémas centrés. En suivant l'idée de Jameson *et al.* (1981), une combinaison linéaire d'opérateurs de viscosité (ordre 2) et d'hyperviscosité (ordre 4) est ajoutée aux résidus pour aider à la résolution des gradients en les adoucissant. Il s'agit alors de déterminer un senseur d'application de cette viscosité, c'est-à-dire une fonction qui varie entre 0 et 1, qui repère efficacement les oscillations numériques et qui reste locale afin de ne pas dégrader la précision du schéma numérique dans le domaine de calcul complet. Pour la phase gazeuse le senseur de Colin (Colin, 2000) est utilisé pour les calculs présentés dans cette thèse. Ce senseur est plus adapté pour une simulation LES que le senseur original de Jameson, il localise plus finement les erreurs numériques des fluctuations turbulentes et prend alors des valeurs plus proches de 1 dans ce cas-là afin d'éliminer rapidement l'oscillation numérique.

Dans le cas des équations de transport de la phase liquide, le senseur de Jameson a été adapté par Riber (2007). Lamarque (2007) a constaté que dans des écoulements diphasiques complexes, ce senseur se déclenchait trop souvent, et la diffusion artificielle devenait non-négligeable. Les senseurs d'application de viscosité artificielle ont donc été étudiés dans le cadre de cette thèse conjointement avec Martinez (2009). Ce travail est présenté au chapitre suivant.

Les différents points évoqués ci-dessus assurent au code AVBP une excellente parallélisation comme l'attestent les tests de temps de calcul réalisés sur un très grand nombre de processeurs de plusieurs supercalculateurs (Staffelbach, 2009).

²Exceptés les termes de fermeture de sous-mailles et du mouvement décorrélié dans l'équation de la quantité de mouvement.

4.3 Conditions aux limites

Les conditions aux limites constituent un point crucial dans tout code de mécanique des fluides. Elle deviennent critiques en LES, et notamment si l'acoustique du système est résolue (Tam & Webb, 1993; Poinso *et al.*, 1999; Schönfeld & Poinso, 1999).

Avant chaque mise à jour du vecteur des variables transportées, le résidu calculé par le schéma numérique doit être corrigé pour imposer les valeurs cibles pour chaque phase de l'écoulement (vitesse, flux de masse, température, pression ...) sur chaque entrée, sortie et paroi du domaine. Pour un code compressible comme AVBP, il est important de maîtriser la propagation des ondes acoustiques depuis leur source dans le domaine jusqu'aux frontières du domaine mais également leur réflexion éventuelle sur les parois et les sorties du domaine. Dans le cas des équations de la phase dispersée, cette difficulté ne se pose pas puisque il n'existe pas de phénomènes acoustiques³.

Les calculs présentés dans cette thèse utilisent les conditions aux limites suivantes :

- Entrées / Sorties

Les conditions d'entrée et de sortie pour la phase gazeuse sont traitées par une approche caractéristique dite NSCBC (Poinso & Lele, 1992), c'est-à-dire que les valeurs cibles sont imposées *via* une décomposition en ondes. Les conditions d'entrée et de sortie pour la phase dispersée sont traitées par une approche de Dirichlet, les valeurs cibles sont imposées sur les variables transportées.

- Parois

Les parois solides dans le domaine de calcul sont vues comme des surfaces imperméables par l'écoulement. Elles peuvent être adhérentes ou non. Les vitesses normale et tangentielle à la surface de la paroi sont donc modifiées en conséquence par une approche de type Dirichlet.

Les détails de la mise en oeuvre et de l'implantation des approches NSCBC et Dirichlet dans AVBP sont présentés dans le manuel utilisateur (Gicquel, 2008) et dans la thèse de Porta (2007).

Pour la phase gazeuse, on peut raisonnablement penser que, pour un point de fonctionnement particulier d'une configuration donnée, les valeurs cibles en entrée et sortie sont précisément déterminées. Par exemple, dans le cas d'un montage expérimental, le débit et la température du mélange en entrée, ainsi que la pression chambre sont contrôlés et mesurés. Par contre, il est plus difficile de connaître ou de mesurer les coefficients de réflexion de sortie qui peuvent jouer un rôle important sur les ondes dans le domaine.

La détermination des valeurs cibles permettant de représenter correctement la physique de la phase dispersée n'est pas évidente. Dans le cas d'un montage expérimental, s'il est

³Dans les équations de la phase dispersée, il n'y a pas de terme de pression.

aisé de contrôler et de mesurer le débit et la température du liquide injecté, il est difficile de caractériser le spray formé à l'issue des processus d'atomisation primaire et secondaire. Un modèle a donc été développé pour créer une condition limite d'entrée à partir des paramètres connus d'injection liquide et des paramètres géométriques de l'atomiseur. Ce travail est développé au Chapitre 7.

L'interaction du spray avec les parois du domaine se limite à une condition de glissement après impact des gouttes sur la paroi. Des phénomènes plus complexes associés à la formation de films liquides existent mais ne sont pas étudiés dans ce travail.

Chapitre 5

Traitements numériques pour les équations de la phase liquide

Sommaire

5.1	Stratégies numériques pour les écoulements diphasiques dans les configurations complexes	81
5.2	Schémas numériques centrés et utilisation de viscosité artificielle pour la phase liquide	84
5.2.1	Effets de dispersion	85
5.2.2	Opérateurs et senseurs de viscosité artificielle	88
5.2.3	Evaluation des senseurs	91
5.2.4	Effet de l'opérateur de viscosité artificielle du 4 ^{ème} ordre	95
5.3	Capture de fronts	98
5.3.1	Limitation des schémas centrés	98
5.3.2	Schémas adaptés à la simulation de la phase dispersée	102

5.1 Stratégies numériques pour les écoulements diphasiques dans les configurations complexes

Les hypothèses mêmes de la dérivation des équations Eulériennes présentées au Chapitre 3 conduisent à un système d'équations difficile à intégrer numériquement et qui, mathématiquement, conduit à des singularités. En effet les équations ne contiennent ni terme de pression, ni terme de diffusion moléculaire. Cela conduit à la formation de fronts ou δ -chocs dont l'occurrence est analysée dans la thèse de De Chaisemartin (2009). Ils apparaissent lorsque l'hypothèse d'unicité locale de la vitesse liquide n'est plus valide. C'est le cas, par exemple, lorsque deux paquets de gouttes de vitesses différentes se croisent. Dans le cadre de notre modélisation, interdisant le croisement de gouttes puisque l'on ne peut localement avoir qu'une seule vitesse d'ensemble, cette situation conduit à un paquet

de gouttes infiniment mince dont la vitesse est la moyenne pondérée par la masse des deux vitesses initiales. De Chaisemartin (2009) démontre la robustesse du schéma numérique qu'il emploie, en réalisant le cas test décrit à la Fig. 5.1. L'épaisseur finale du paquet de gouttes est résolue sur une maille de calcul.

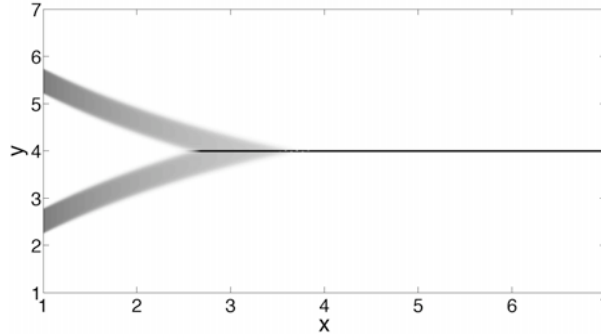


FIG. 5.1: Figure extraite de (De Chaisemartin, 2009) illustrant la formation d'un δ -choc avec la méthode multi-fluide monocinétique. Densité massique de deux paquets de gouttes de nombre de Stokes $St = 5.29$. A l'intersection des deux trajectoires, les paquets fusionnent.

Dans l'approche Euler-Euler *mésoscopique*, une telle situation générerait un fort terme source de production d'énergie décorrélée tendant à élargir le paquet de gouttes final. La forte concentration de gouttes ainsi que le fort terme source associé, si ils sont mal résolus, sont susceptibles de faire diverger le calcul. De la même façon un effet artificiel de moyenne apparaît lorsque deux paquets de gouttes de diamètre différent se croisent, du fait de l'approche monodisperse.

Comme l'a démontré De Chaisemartin (2009), la résolution des équations aux moments pour la phase liquide dispersée requiert des méthodes numériques robustes. Plusieurs stratégies numériques disponibles dans AVBP ont été mises en oeuvre sur la configuration MERCATO dans le cadre de cette thèse. Ces travaux ont été initiés par Lamarque (2007) et Roux (2009) sur différents cas tests, par Martinez (2009) et Vié *et al.* (2009) sur des configurations d'injection Diesel haute pression. Le tableau 5.1 présente les stratégies disponibles dans AVBP, correspondant à un ensemble de méthodes numériques : schéma numérique, viscosité artificielle, senseur de viscosité artificielle et prise en compte ou non du mouvement décorrélé. Elles sont détaillées et évaluées sur des cas tests simples dans les sections suivantes, et mises en oeuvre sur la configuration MERCATO (Partie). Elles peuvent être regroupées en deux catégories :

- Schémas centrés et viscosité artificielle
- Schémas décentrés

L'ordre des schémas donnés au Tab. 5.1 a été mesuré sur des cas tests linéaires par Colin & Rudgyard (2000) et Lamarque (2007). Ceci ne garantit pas cependant que cet ordre soit

conservé sur un maillage non structuré avec de fortes variations de taille de maille comme celui Fig. 9.2 utilisé pour la configuration MERCATO.

Stratégie Numérique	Schéma Numérique		Ordre du schéma	Senseur de VA ¹	Activation du modèle RUM ²	Testée sur Mercato
TTGC_AV_1	TTGC	TTGC	3ème	JR ³	Non	(Lamarque, 2007)
TTGC_AV_3	TTGC	TTGC	3ème	CMS ⁴	Non	★
TTGC_RUE_AV_4	TTGC	TTGC	3ème	CMS-lite ⁵	Oui	★
PSI_AV_3	LW	PSI	2ème / 1er	CMS	Non	★
FCT_AV_1	LW	FCT LW-PSI ⁶	2ème	JR	Oui/Non	(Roux, 2009)

TAB. 5.1: *Stratégies numériques employées sur la configuration Mercato. Le symbole ★ repère les stratégies qui ont été évaluées dans ce travail.*

¹L'acronyme VA est utilisé pour Viscosité Artificielle.

²L'acronyme RUM est utilisé pour *Random Uncorrelated Motion*, la traduction en anglais du mouvement décorrélé.

³Les initiales JR correspondent à Jameson-Riber. Il s'agit du senseur Jameson modifié par Riber (2007).

⁴Les initiales CMS corresondent à Colin-Martinez-Sanjosé. Il s'agit du senseur Colin adapté utilisé dans la thèse de Martinez (2009) et dans les travaux de cette thèse.

⁵Ce senseur a été mis au point par Martinez (2009), il n'a pas été encore intégré dans AVBP.

⁶Ce schéma a été écrit dans une version de développement par Roux (2009), il n'a pas été encore intégré dans AVBP.

5.2 Schémas numériques centrés et utilisation de viscosité artificielle pour la phase liquide

De manière générale, les schémas de convection employés pour la LES doivent être précis en temps et en espace. Dans le cas d'AVBP, les schémas centrés ont été préférés car leur stencil est plus petit pour une précision donnée (cela limite donc les besoins en mémoire et en communication). Ils sont moins coûteux et très peu dissipatifs. Ils ont par contre l'inconvénient d'être dispersifs et instables lorsqu'ils rencontrent de forts gradients. Ces deux propriétés (dissipation/dispersion) mesurent l'aptitude d'un schéma numérique à transporter un signal sans l'amortir et sans modifier sa vitesse de convection. Dans sa thèse, Lamarque (2007) a quantifié la dispersion et la dissipation des schémas de convection d'AVBP. Ces mesures sont reproduites sur la Fig. 5.2.

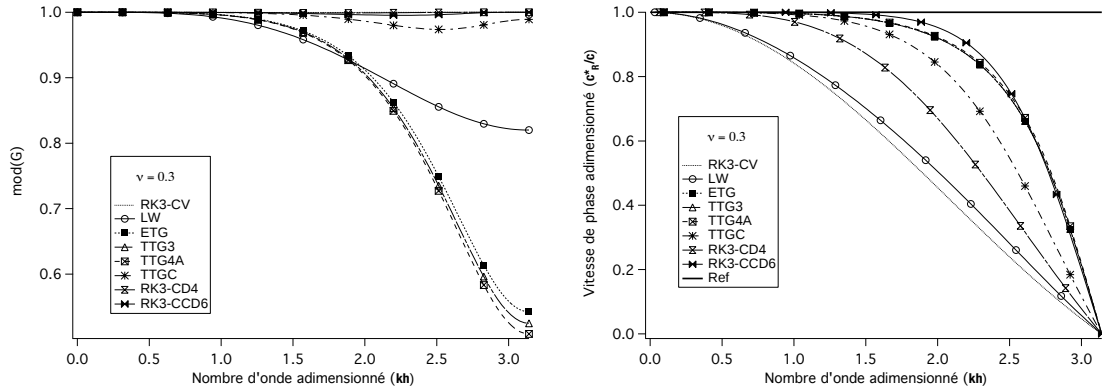


FIG. 5.2: Extrait de (Lamarque, 2007) : quantification des erreurs de dissipation (gauche) et de dispersion (droite) de différents schémas numériques de convection.

Lorsqu'il s'agit de transporter les grandeurs de la phase dispersée, qui présentent souvent de forts gradients, la dispersion du schéma numérique devient très gênante. Ainsi Riber (2007) dans sa thèse a démontré que le schéma TTGC du 3ème ordre en temps et en espace donnait de meilleurs résultats que le schéma Lax-Wendroff du 2nd ordre, plus dispersif comme le montre la figure Fig. 5.2. Cependant, même la dispersion faible du schéma TTGC peut engendrer de fortes erreurs dans les calculs diphasiques. En effet, un schéma centré ne peut pas résoudre sans viscosité locale les sauts de variables qui peuvent apparaître sur la phase dispersée.

Dans ce chapitre, les difficultés numériques rencontrées en diphasique sont mises en évidence sur un cas test monodimensionnel de convection pure. Le domaine de calcul est rectangulaire et mesure 1 m de hauteur sur 30 mm de longueur⁷. Les bords gauche et droit du domaine sont des conditions de périodicité, afin de représenter un domaine infini, et les bords haut et bas sont des conditions de symétrie afin de contraindre le système à rester 1D. Deux maillages cartésiens réguliers de 50 et 100 cellules sont utilisés pour montrer l'effet de la discrétisation sur la solution. Les pas de discrétisation spatiale Δx , Δy et temporelle Δt sont donnés dans le tableau ci-dessous. n_x , n_y correspondent aux nombres de cellules

dans la direction de propagation et dans la direction transversale, respectivement.

Maillage	Type d'élément	Discrétisation	Espacement	Pas de temps ⁸
		n_x, n_y	Δ_x, Δ_y (m)	Δt pour CFL= 0.7
50 cellules	rectangles	50×1	$6 \times 10^{-4}, 1$	9.5×10^{-7} s
100 cellules	rectangles	100×1	$3 \times 10^{-4}, 1$	4.8×10^{-7} s

TAB. 5.2: *Caractéristiques des deux maillages utilisés.*

La solution initiale correspond à un champ diphasique uniforme sur lequel une perturbation gaussienne sur une ou plusieurs variables mésoscopiques est superposée. Les termes de couplage entre les phases étant désactivés, les deux systèmes d'équations pour le gaz et la phase dispersée sont totalement découplés. Les modèles de sous-mailles et de fermeture pour le mouvement décorrélé sont désactivés. La solution initiale non perturbée correspond à un champ uniforme de gouttes de diamètre $d_0 = 20 \mu\text{m}$ et de densité de particules $\check{n}_{l,0} = 10^{10} \text{ m}^{-3}$ en convection à vitesse constante $\check{u}_{l,0} = 10 \text{ m/s}$. Le temps convectif, $t_{\text{conv}} = 3 \text{ ms}$, est défini comme le temps nécessaire pour transporter une information à la vitesse $\check{u}_{l,0}$ sur une longueur du domaine soit 30 mm. Le système d'équations résolu pour la phase dispersée peut ainsi s'écrire :

$$\frac{\partial}{\partial t} \check{\alpha}_l + \frac{\partial}{\partial x} \check{\alpha}_l \check{u}_l = 0 \quad (5.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \check{\alpha}_l \check{u}_l + \frac{\partial}{\partial x} \check{\alpha}_l \check{u}_l^2 = 0 \quad (5.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \check{n}_l + \frac{\partial}{\partial x} \check{n}_l \check{u}_l = 0 \quad (5.3)$$

Les perturbations gaussiennes sont placées au centre du domaine et ont une largeur de 1 mm. Elles sont définies sur 7 noeuds⁹ de maillage pour le cas à 50 cellules et 15 noeuds pour le cas à 100 cellules.

5.2.1 Effets de dispersion

Une perturbation est initialisée sur les champs de fraction volumique et de diamètre de gouttes. L'amplitude correspond à 50% de la valeur initiale. La solution obtenue avec le schéma TTGC après un temps convectif est superposée à la solution initiale pour chaque champ et chaque maillage à la figure Fig. 5.3. Le diamètre n'étant pas transporté et les champs de vitesse et de densité de gouttes étant constants, le système Eqs. (5.1-5.3) se

⁷Le choix de la hauteur de 1 m assure que le calcul du pas de temps à partir du nombre CFL calculé en 2D via la Jacobienne des flux soit identique au calcul du pas de temps par une formule monodimensionnelle $\Delta t = \frac{\text{CFL} \cdot \Delta x}{u+c}$.

⁸Pour comparaison, le pas de temps dans les calculs MERCATO présentés en partie 3 de cette thèse est de 2.2×10^{-7} s.

⁹Correspondant à la résolution typique dans le cas d'une configuration complexe.

réduit à une équation de transport linéaire :

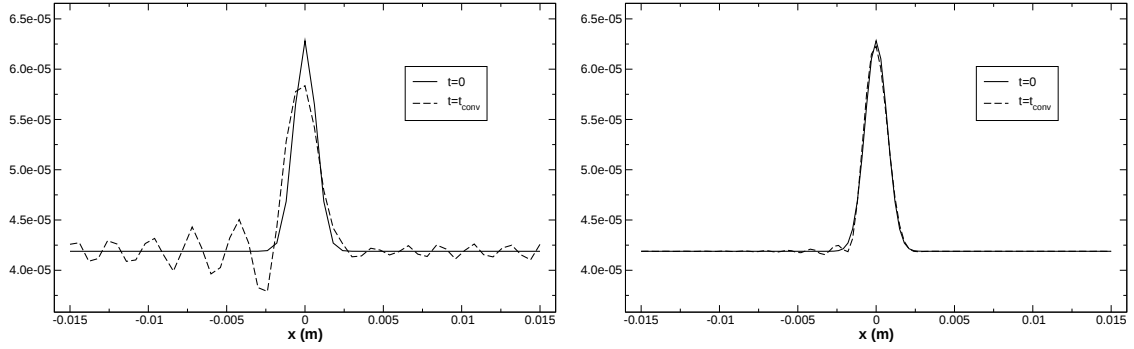
$$\frac{\partial}{\partial t} \check{\alpha}_l + \check{u}_{l,0} \frac{\partial}{\partial x} \check{\alpha}_l = 0 \quad (5.4)$$

La solution initiale est donc aussi la solution analytique après un temps convectif (c'est-à-dire après un tour de domaine périodique). Le diamètre est reconstruit à partir de la densité et de la fraction volumique.

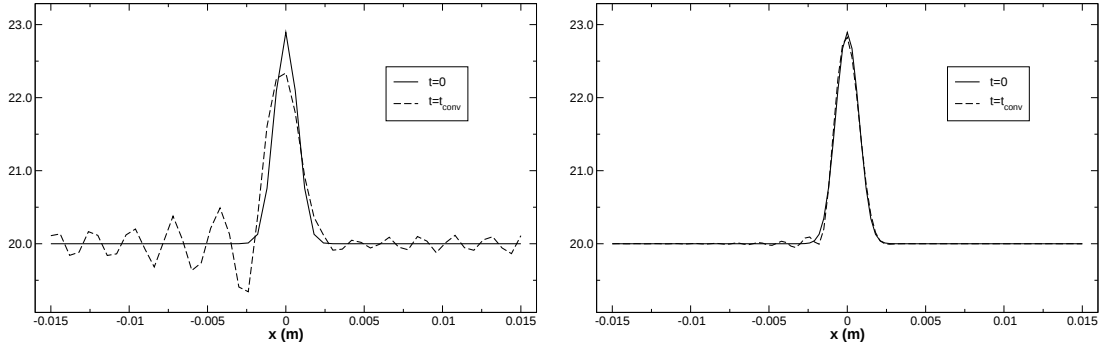
Le schéma TTGC est peu dissipatif puisque, même sur le maillage grossier, près de 80 % de l'amplitude du signal est restituée après un temps convectif. En revanche, les gradients associés à la perturbation initiale étant très importants, on voit apparaître des signaux secondaires à l'arrière de la gaussienne. Le paquet de gouttes est artificiellement transformé en un train de paquets de gouttes de plus petit diamètre. Ces signaux, caractéristiques de la dispersion du schéma¹⁰, atteignent près de 20 % de l'amplitude du pic principal sur le maillage grossier. La répartition de gouttes restant uniforme et constant, l'erreur se répercute sur le diamètre.

La dispersion du schéma altère donc le signal physique. Pour limiter cet effet, l'utilisation de viscosité artificielle est nécessaire. Son application doit être ciblée afin de réduire l'amplitude des pics secondaires mais préserver autant que possible l'amplitude du signal primaire.

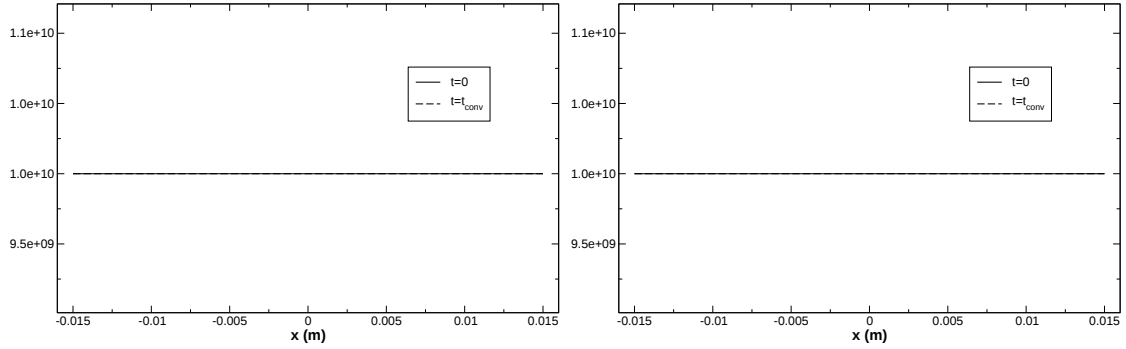
¹⁰Puisque les ondes de fréquence différentes ne sont pas convectées à la même vitesse par le schéma.



(a) Profils de fraction volumique - α_l .



(b) Profils de diamètre de gouttes - d en μm .



(c) Profils de densité de gouttes - $\tilde{n}_l$ en m^{-3} .

FIG. 5.3: Mise en évidence de la dispersion du schéma TTGC et de son effet sur la reconstruction du diamètre des gouttes après un temps convectif. À gauche, résolution sur le maillage de 50 cellules, à droite sur celui de 100 cellules.

5.2.2 Opérateurs et senseurs de viscosité artificielle

Un opérateur de diffusion artificielle est appliqué aux résidus calculés par le schéma dans le but d'adoucir les forts gradients et de supprimer les oscillations observées à la Fig. 5.3. Jameson *et al.* (1981) ont recommandé l'utilisation couplée d'opérateurs de viscosité (ordre 2) et d'hyperviscosité (ordre 4). L'opérateur de viscosité est construit à partir d'un Laplacien. Il est multiplié par un paramètre utilisateur $\epsilon^{(2)}$ et par un senseur d'application ζ . Le senseur est une fonction comprise entre 0 et 1 qui mesure la non-linéarité d'une variable scalaire de référence. Le senseur localise les forts gradients et limite l'application de la viscosité à des zones bien précises du domaine de calcul. L'hyperviscosité permet d'éliminer les oscillations noeud à noeud (*wiggles*). Elle est appliquée partout sauf là où l'opérateur de viscosité est appliqué. L'opérateur d'hyperviscosité est multiplié par le paramètre $\epsilon^{(4*)}$ qui est construit à partir d'un paramètre utilisateur $\epsilon^{(4)}$ et du senseur d'application ζ :

$$\epsilon^{(4*)} = \max \left(0, \epsilon^{(4)} - \zeta \epsilon^{(2)} \right) \quad (5.5)$$

Le détail de la discrétisation des opérateurs est donné dans la thèse de Lamarque (2007). Tout l'*art* de cette méthode de stabilisation réside dans la construction du senseur ζ . Pour la phase gazeuse compressible deux senseurs sont disponibles dans AVBP : le senseur de Jameson *et al.* (1981) et celui de Colin (2000). Le senseur de Colin est une adaptation du senseur de Jameson aux calculs fortement instationnaires comme ceux employant des schémas précis tel que TTGC. L'application de la viscosité est alors bien limitée aux zones de fortes non linéarités.

Senseur de Jameson

La variable de référence notée S pour le senseur de Jameson $\zeta_{\Omega_j}^J$ est la pression, qui est une variable gazeuse reconstruite à partir de l'ensemble des variables transportées : densité, énergie totale et quantité de mouvement, et même fractions massiques des espèces du mélange. Le senseur $\zeta_{\Omega_j}^J$ est calculé au centre de la cellule Ω_j comme le maximum de ses valeurs ζ_k^J aux sommets k de la cellule considérée. Il mesure l'écart entre la variation de S au sein de la cellule Δ_1^k et de la variation de S maille à maille Δ_2^k

$$\zeta_{\Omega_j}^J(S) = \max_{k \in \Omega_j} \zeta_k^J(S) \quad (5.6)$$

$$\zeta_k^J(S) = \frac{\Delta_1^k - \Delta_2^k}{\Delta_1^k + \Delta_2^k + S_k} \quad (5.7)$$

$$\Delta_1^k = S_{\Omega_j} - S_k \quad \Delta_2^k = (\vec{\nabla} S)_k \cdot (\vec{x}_{\Omega_j} - \vec{x}_k) \quad (5.8)$$

Senseur de Colin

Le senseur de Colin $\zeta_{\Omega_j}^C$ est construit comme une sorte d'amplificateur passe-haut du senseur de Jameson $\zeta_{\Omega_j}^J$. Il distingue les zones bien résolues de forts gradients, des zones où

les gradients correspondent à des oscillations numériques de grande amplitude. Ce senseur utilise des paramètres *ad-hoc* Eq. (5.13) évalués sur des cas de simulation numérique directe de THI (Colin, 2000). La variable de référence S pour le senseur de Colin est l'énergie totale, qui est une variable gazeuse transportée.

$$\zeta_{\Omega_j}^C(S) = \frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(\frac{\Psi(S) - \Psi_0}{\delta} \right) \right) - \frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(\frac{-\Psi_0}{\delta} \right) \right) \quad (5.9)$$

$$\text{avec : } \Psi(S) = \max_{k \in \Omega_j} \left(0, \frac{\Delta^k}{\Delta^k + \epsilon_1 S_k} \zeta_k^J(S) \right) \quad (5.10)$$

$$\Delta^k = \Delta_1^k - \Delta_2^k - \epsilon^k \max \left(\Delta_1^k, \Delta_2^k \right) \quad (5.11)$$

$$\epsilon^k = \epsilon_2 \left(1 - \epsilon_3 \frac{\max \left(\Delta_1^k, \Delta_2^k \right)}{\Delta_1^k + \Delta_2^k + S_k} \right) \quad (5.12)$$

$$\begin{aligned} \Psi_0 &= 2 \times 10^{-2} & \delta &= 1 \times 10^{-2} \\ \epsilon_1 &= 1 \times 10^{-2} & \epsilon_2 &= 0.95 & \epsilon_3 &= 0.5 \end{aligned} \quad (5.13)$$

Adaptation des senseurs pour la phase liquide

Dans le cas des équations de la phase dispersée, il est difficile de sélectionner une grandeur de référence sur laquelle repérer l'ensemble des problèmes numériques. Ainsi si l'application de la viscosité artificielle est identique pour les phases gazeuse et dispersée, puisqu'elle utilise les mêmes opérateurs, le senseur d'application doit être adapté à la spécificité de la phase dispersée.

Senseur JR

Riber (2007) dans ses travaux de thèse propose d'étendre le senseur de Jameson en l'évaluant non pas sur une grandeur de référence mais sur l'ensemble des variables diphasiques. Ainsi, le senseur $\zeta_{tpf, \Omega_j}^{JR}$ est le maximum des valeurs calculées pour chaque variable transportée. Il ne manque pas de repérer des erreurs numériques malgré la forte non linéarité des équations.

$$\zeta_{tpf, \Omega_j}^{JR} = \max \left[\zeta_{\Omega_j}^J(\rho_l \bar{\alpha}_l), \zeta_{\Omega_j}^J(\hat{\mathbf{u}}_l), \zeta_{\Omega_j}^J(\hat{\delta \theta}_l), \zeta_{\Omega_j}^J(\hat{h}_{s,l}), \zeta_{\Omega_j}^J(\bar{n}_l) \right] \quad (5.14)$$

Dans ses travaux de thèse, et notamment sur la configuration MERCATO, Lamarque (2007) a montré que l'application de ce senseur de viscosité artificielle n'était pas suffisamment ciblée. En effet le senseur, du fait de sa construction, est très souvent activé et ne permet pas de localiser les zones à forts gradients où la VA est nécessaire.

Senseur CMS

Plus récemment, Martinez (2009) suggère d'adapter le senseur de Colin aux écoulements diphasiques. Ce senseur est en effet plus adapté aux forts gradients présents dans les calculs instationnaires que le senseur de Jameson, et convient mieux à la phase dispersée.

L'idée est alors d'utiliser deux variables de référence au lieu d'une seule dans le cas gazeux. Le choix se porte sur la fraction massique de liquide $\rho_l \bar{\alpha}_l$ et le diamètre reconstruit d . La fraction volumique présente naturellement des gradients importants et permet de cibler les zones où la résolution est suffisante. Le diamètre joue un rôle double. Comme observé dans le cas test précédent (Fig. 5.3) il est plus sensible aux effets de dispersion du schéma et donc au manque de résolution spatiale. D'autres part les termes sources de couplage sont liés au diamètre. Les zones de gradients de diamètre identifient donc des zones dans lesquelles les termes sources varient rapidement. Comme les termes sources de couplage gaz-liquide sont des termes sources numériquement raides et que leur calcul n'est pas implicite, ils sont parfois sources d'instabilités numériques. L'utilisation du diamètre dans l'évaluation du senseur de Colin permet alors d'identifier les zones où le comportement de la phase liquide se modifie fortement, pouvant engendrer des problèmes numériques.

La seconde adaptation faite par rapport au cas gazeux est d'utiliser non pas la valeur au noeud S_k des variables de référence $\rho_l \bar{\alpha}_l$ et d dans les expressions Eq. (5.7) et Eq. (5.10) mais leur valeur au centre de la cellule S_{Ω_j} . Cette adaptation permet de ne pas saturer le senseur dans les zones de forts gradients relativement bien résolus. En effet, dans la phase dispersée, dont les équations sont dépourvues de terme de pression, les fronts résolus des grandeurs liquides tendent à s'amincir autant que le maillage le permet conduisant inévitablement à des forts gradients résolus sur peu de points. Néanmoins ces fronts ne sont pas des oscillations numériques : le senseur doit donc s'activer pour aider à la résolution mais ne doit pas saturer à 1.

$$\zeta_{tpf, \Omega_j}^{CMS} = \frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(\frac{\Psi' - \Psi_0}{\delta} \right) \right) - \frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(\frac{-\Psi_0}{\delta} \right) \right) \quad (5.15)$$

$$\text{avec : } \Psi' = \max [(\Psi_{tpf}(\rho_l \bar{\alpha}_l), \Psi_{tpf}(d))] \quad (5.16)$$

$$\Psi_{tpf}(S) = \max_{k \in \Omega_j} \left(0, \frac{\Delta^k}{\Delta^k + \epsilon_1 S_{\Omega_j}} \zeta_k^{J'}(S) \right) \quad (5.17)$$

$$\zeta_k^{J'}(S) = \frac{\Delta_1^k - \Delta_2^k}{\Delta_1^k + \Delta_2^k + S_{\Omega_j}} \quad (5.18)$$

Δ_1^k et Δ_2^k sont calculés selon Eq. (5.8), Δ^k selon Eq. (5.11). Les paramètres *ad-hoc* de l'Eq. (5.13) sont conservés.

Senseur CMS-lite

Une variante du senseur CMS $\zeta_{tpf, \Omega_j}^{CMS}$ permet de ne pas masquer les effets de la viscosité $\hat{\nu}_{RUM}$ liée au mouvement décorrélié en augmentant le niveau de Ψ_{tpf} pour lequel le senseur sature. Le senseur CMS-lite $\zeta_{tpf, \Omega_j}^{CMS-lite}$ est identique au senseur $\zeta_{tpf, \Omega_j}^{CMS}$, seul le paramètre

ϵ_1 dans l'évaluation des $\Psi_{tpf}(S)$ (Eq. (5.17)) est modifié et dépend de la variable de référence S :

$$\epsilon_1(\rho_l \bar{\alpha}_l) = 5 \times 10^{-2} \quad \text{et} \quad \epsilon_1(d) = 2 \times 10^{-2} \quad (5.19)$$

5.2.3 Evaluation des senseurs

Le cas test présenté au paragraphe §-5.2.1 est reproduit en activant l'opérateur de viscosité artificielle afin d'évaluer l'influence des différents senseurs d'application. Afin d'accentuer l'influence du senseur, la valeur du paramètre $\epsilon^{(2)}$ est fixée pour tous les senseurs à 0.3, une valeur relativement importante pour un cas test mono-dimensionnel, tandis que la valeur du paramètre $\epsilon^{(4)}$ est fixée à 0. La solution obtenue après un temps convectif est superposée à la solution initiale qui correspond également à la solution théorique de l'Eq. (5.4). Pour les maillages de 50 et 100 cellules, la solution obtenue est donnée à la Fig. 5.4 pour le senseur JR, Fig. 5.5 pour le senseur CMS, et Fig. 5.6 pour le senseur CMS-lite.

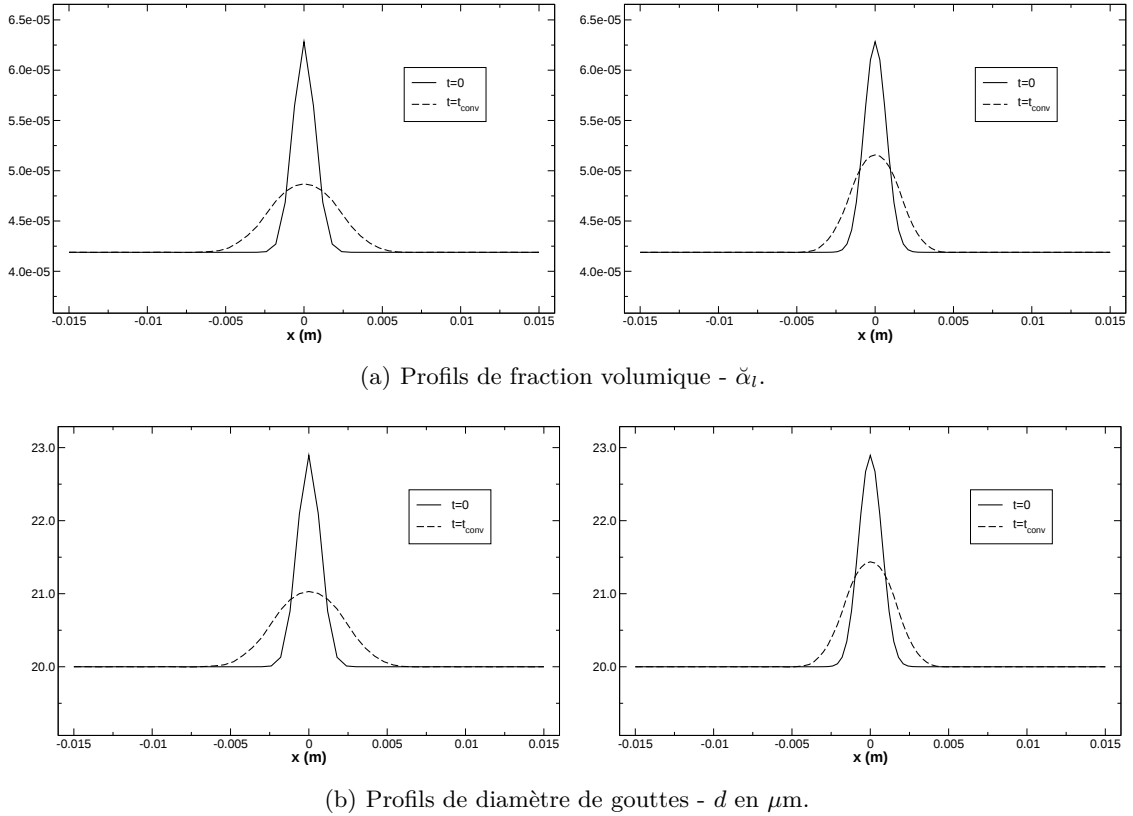


FIG. 5.4: Mise en évidence de l'effet de la viscosité artificielle appliquée par le senseur JR. À gauche, résolution sur le maillage de 50 cellules, à droite sur celui de 100 cellules.

En employant le senseur JR, la viscosité artificielle élimine efficacement les oscillations secondaires qui étaient visibles à la Fig. 5.3. Elle a pour effet majeur dans ce cas (Fig. 5.4)

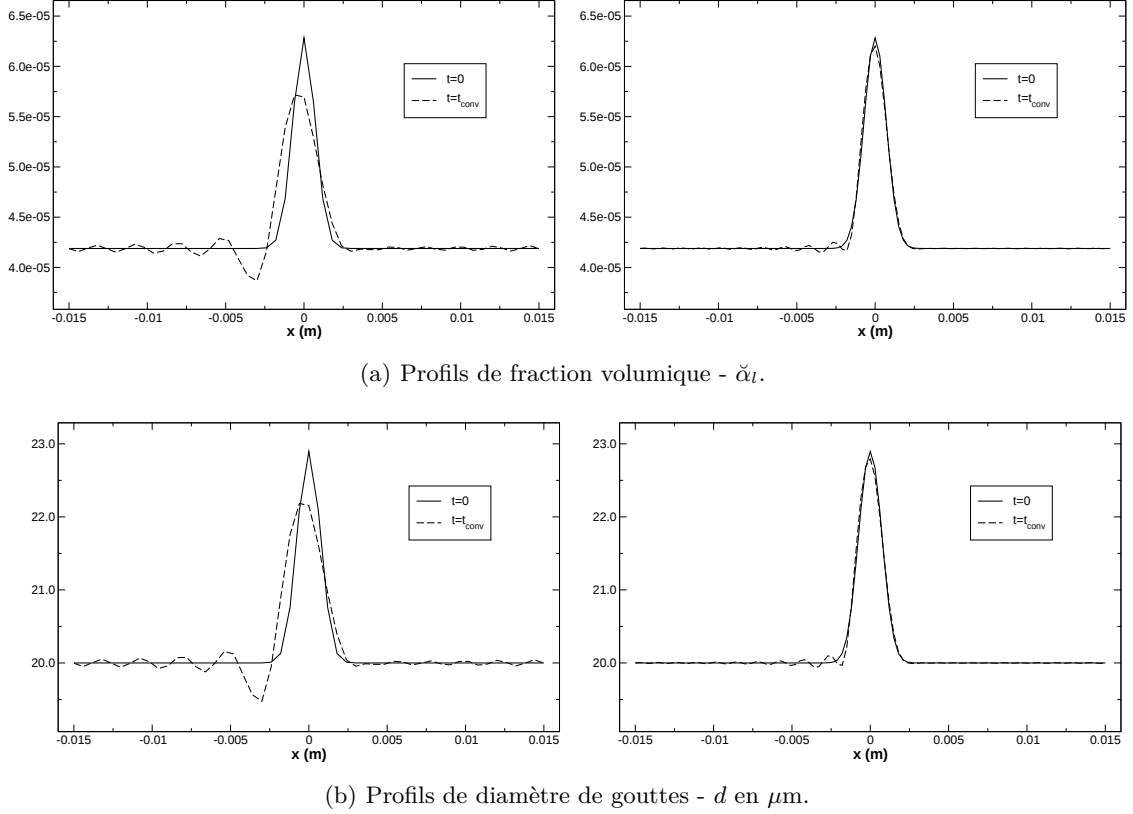


FIG. 5.5: Mise en évidence de l'effet de la viscosité artificielle appliquée par le senseur CMS. À gauche, résolution sur le maillage de 50 cellules, à droite sur celui de 100 cellules.

de lisser les gradients pour réduire les oscillations, et d'amortir et d'étaler les pics. La solution reste *positive*. L'inconvénient majeur est la perte d'amplitude de la perturbation : près de 70 % de l'amplitude de la perturbation de fraction volumique est diffusée sur le maillage à 50 cellules, et 50 % sur le maillage à 100 cellules.

Le senseur CMS amortit les oscillations secondaires, adoucit légèrement les gradients, et conserve une amplitude raisonnable du pic principal : plus de 73 % de l'amplitude de la perturbation de fraction volumique est restituée sur le maillage de 50 cellules, et plus de 95 % sur le maillage de 100 cellules.

Le senseur CMS-lite amortit très légèrement les oscillations secondaires, il ne modifie quasiment pas les gradients et l'amplitude du pic primaire.

On calcule l'erreur associée à la stratégie numérique avec la norme L_2 de la difference entre la solution obtenue après un temps convectif et la solution exacte¹¹.

$$\mathcal{E} = \frac{1}{L_D} \int_{-L_D/2}^{L_D/2} [(\rho_l \check{\alpha}_l)_{\text{exact}} - (\rho_l \check{\alpha}_l)_{\text{num}}]^2 dx \quad (5.20)$$

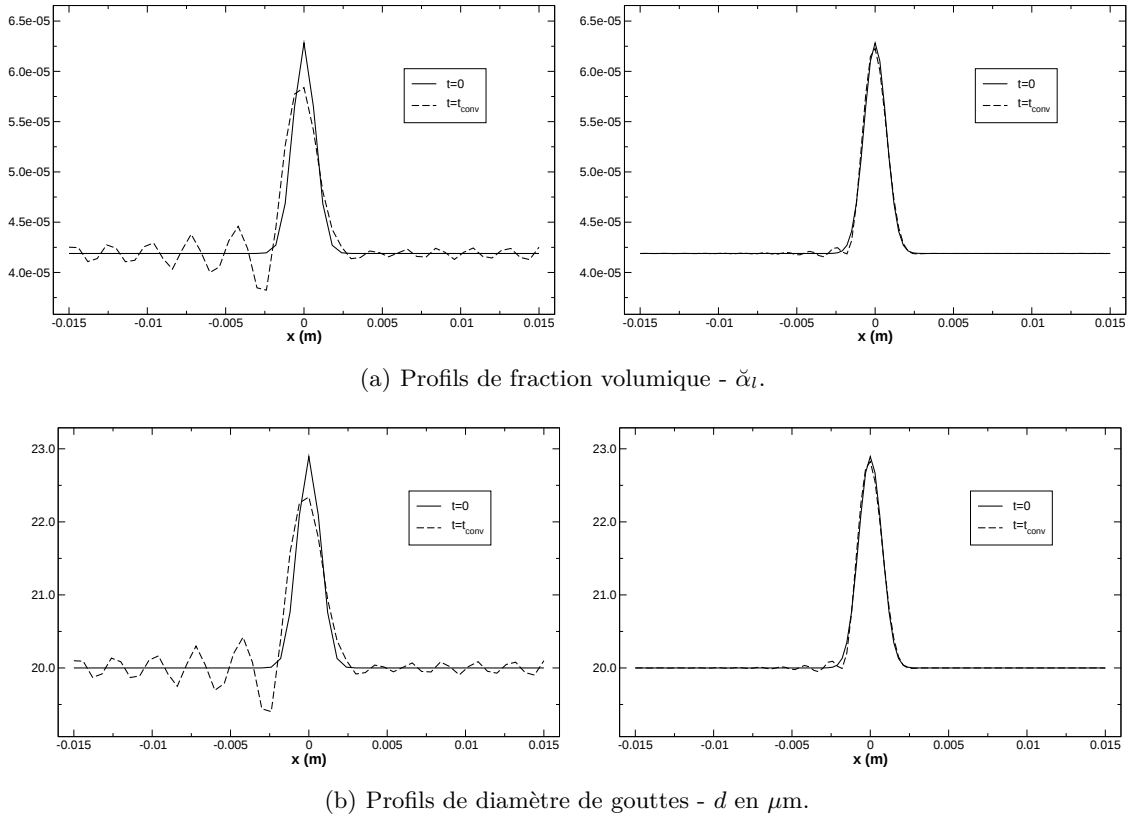


FIG. 5.6: Mise en évidence de l'effet de la viscosité artificielle appliquée par le senseur CMS-lite. À gauche, résolution sur le maillage de 50 cellules, à droite sur celui de 100 cellules.

où la longueur du domaine est notée $L_D = 30$ mm.

L'erreur $\mathcal{E}$ donnée par l'Eq. (5.20) est calculée pour les trois stratégies présentées et sur les deux maillages considérés. Les résultats sont présentés à la figure Fig. 5.7. La stratégie employant le senseur JR génère une erreur bien supérieure à celle du schéma seul. De plus lorsque l'on augmente la résolution, la diminution de l'erreur est faible : sur les deux maillages, l'erreur mesurée est du même ordre de grandeur. En revanche, les erreurs relatives aux stratégies employant les senseurs CMS et CMS-lite sont très proches, et elles retrouvent le même ordre de grandeur que l'erreur du schéma seul. Ainsi la viscosité artificielle dans le cas des senseurs CMS ne modifie pas l'ordre du schéma. L'erreur diminue pour ces senseurs lorsque la résolution spatiale augmente. Ceci signifie que le senseur est capable d'identifier les gradients bien résolus, et ne les adoucit pas.

Pour évaluer la perte de précision du schéma par l'utilisation du senseur JR, on peut calculer un coefficient de viscosité associé à la diffusion artificielle. Comme l'a montré Lamarque (2007) dans sa thèse, la discrétisation sur un maillage monodimensionnel de l'opérateur du second ordre fait apparaître un terme Laplacien, dont le facteur détermine le coefficient de diffusion artificielle. L'Eq. (5.4) en présence de viscosité artificielle est

¹¹La solution exacte correspond à la solution initiale pour ce cas de convection pure (Eq. (5.4)).

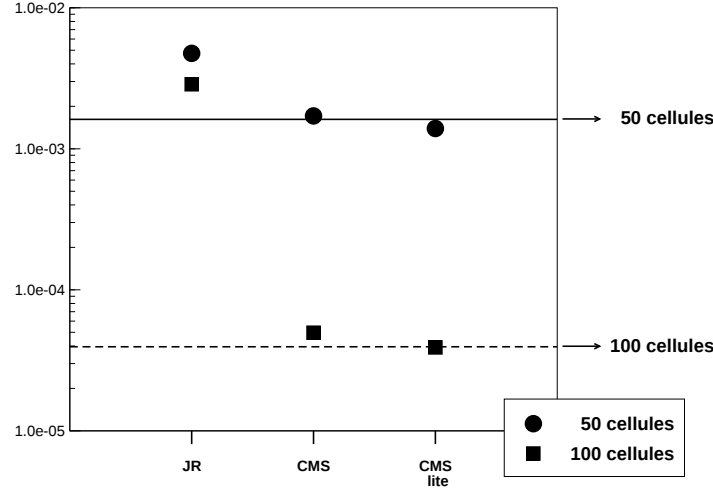


FIG. 5.7: Mesure de l'erreur $\mathcal{E}$ obtenue en employant le schéma TTGC et de la viscosité artificielle appliquée par les senseurs JR, CMS et CMS-lite. Les lignes horizontales correspondent à l'erreur du schéma seul, les symboles correspondent à l'erreur de l'ensemble schéma plus viscosité artificielle.

modifiée selon :

$$\frac{\partial}{\partial t} \check{\alpha}_l + \check{u}_{l,0} \frac{\partial}{\partial x} \check{\alpha}_l = \nu^{AV} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \check{\alpha}_l \quad (5.21)$$

où ν^{AV} est calculée au noeud j selon l'expression ci-dessous, avec ζ_j le senseur d'application distribué au noeud du maillage :

$$\nu_j^{AV} = \frac{\epsilon^{(2)} \zeta_j h^2}{4 \Delta t} \quad (5.22)$$

où h^2 dépend de la résolution spatiale : pour les maillages utilisés, $h^2 = \Delta x \cdot \Delta y$ où Δx et Δy sont donnés dans le Tab. 5.2. Les coefficients calculés pour la solution à l'instant $t = t_{\text{conv}}$ obtenue avec le schéma TTGC et les senseurs JR, CMS et CMS-lite sont présentés à la Fig. 5.8 pour les deux maillages utilisés.

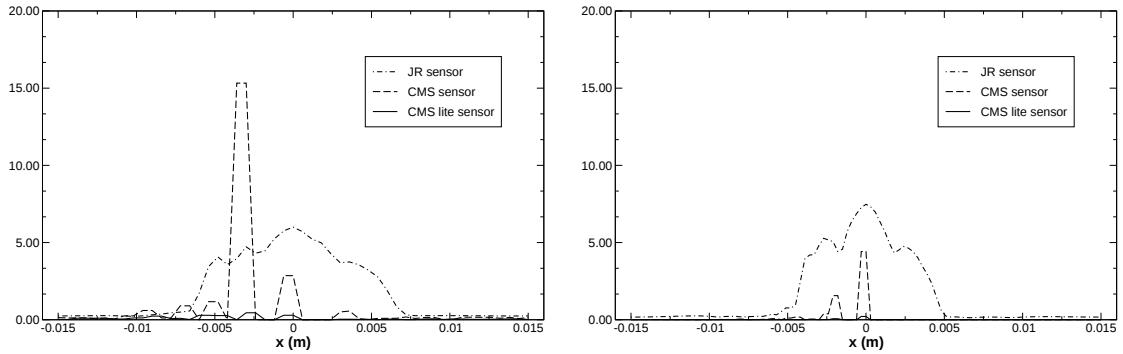


FIG. 5.8: Coefficient de viscosité artificielle ν^{AV} associé aux différents senseurs, donné en m^2/s . À gauche, maillage de 50 cellules, à droite, celui de 100 cellules.

Tandis que le senseur CMS applique la viscosité artificielle sur des cellules bien localisées, le senseur JR étend l'application sur une zone très large. Lorsque la résolution augmente, et que les gradients sont alors mieux résolus, le maximum de viscosité diminue avec le senseur CMS, tandis qu'il augmente avec le senseur JR. Ainsi la perte de précision de la solution s'explique par le fait que le senseur JR n'a pas une application locale et engendre un excès de viscosité artificielle. Le senseur CMS-lite ne se déclenche quasiment pas, la viscosité ajoutée est très faible comparée à celle associée aux utilisant les senseurs JR ou CMS.

Les observations faites sur ce cas test peuvent se résumer sous la forme d'un tableau (Tab. 5.3).

	JR	CMS	CMS-lite
erreur	--	-	+
dissipation	--	-	-/+
dispersion	++	+	-/+

TAB. 5.3: *Résumé des observations faites sur les senseurs d'application de viscosité artificielle. L'effet sur les différents points observés est noté : -- médiocre, - faible, -/+ pas d'effet, + positif, ++ efficace.*

Pour limiter la dispersion du schéma numérique, le senseur CMS-lite ne semble pas adapté, puisque les oscillations secondaires ne sont quasiment pas amorties. Le senseur JR qui élimine efficacement les effets de dispersion, semble néanmoins s'activer trop souvent et générer un excès de viscosité artificielle. Le senseur CMS, semble être un bon compromis entre précision et limitation de la dispersion dans le cas d'une simulation fortement instationnaire pour laquelle de forts gradients résolus peuvent apparaître et déstabiliser la résolution.

5.2.4 Effet de l'opérateur de viscosité artificielle du 4^{ème} ordre

Pour étudier l'influence de l'opérateur de viscosité artificielle du 4^{ème} ordre, le cas test présenté au paragraphe §-5.2.1 est reproduit en faisant varier le paramètre utilisateur $\epsilon^{(4)}$. Les profils de fraction volumique de liquide obtenus avec le senseur CMS et $\epsilon^{(2)}$ fixé à 0.3, sur le maillage de 50 cellules, après un temps convectif, sont présentés à la figure Fig. 5.9.

L'opérateur de viscosité artificielle du 4^{ème} ordre est très efficace pour amortir les oscillations secondaires dues à la dispersion du schéma et au phénomène de Gibbs. Comme précédemment, son effet peut être quantifié en calculant la norme L_2 de la différence de la solution numérique à la solution analytique, selon l'expression Eq. (5.20). Cet exercice est fait sur le maillage de 50 cellules et celui de 100 cellules. Les erreurs $\mathcal{E}$ sont comparées Fig. 5.10 aux erreurs du schéma TTGC sans application de viscosité artificielle. Pour le maillage de 50 cellules, il semble qu'il y ait une valeur optimale qui permette de minimiser l'erreur numérique pour $\epsilon^{(4)} \in [0.0025, 0.005]$. En revanche cet optimum sur le maillage

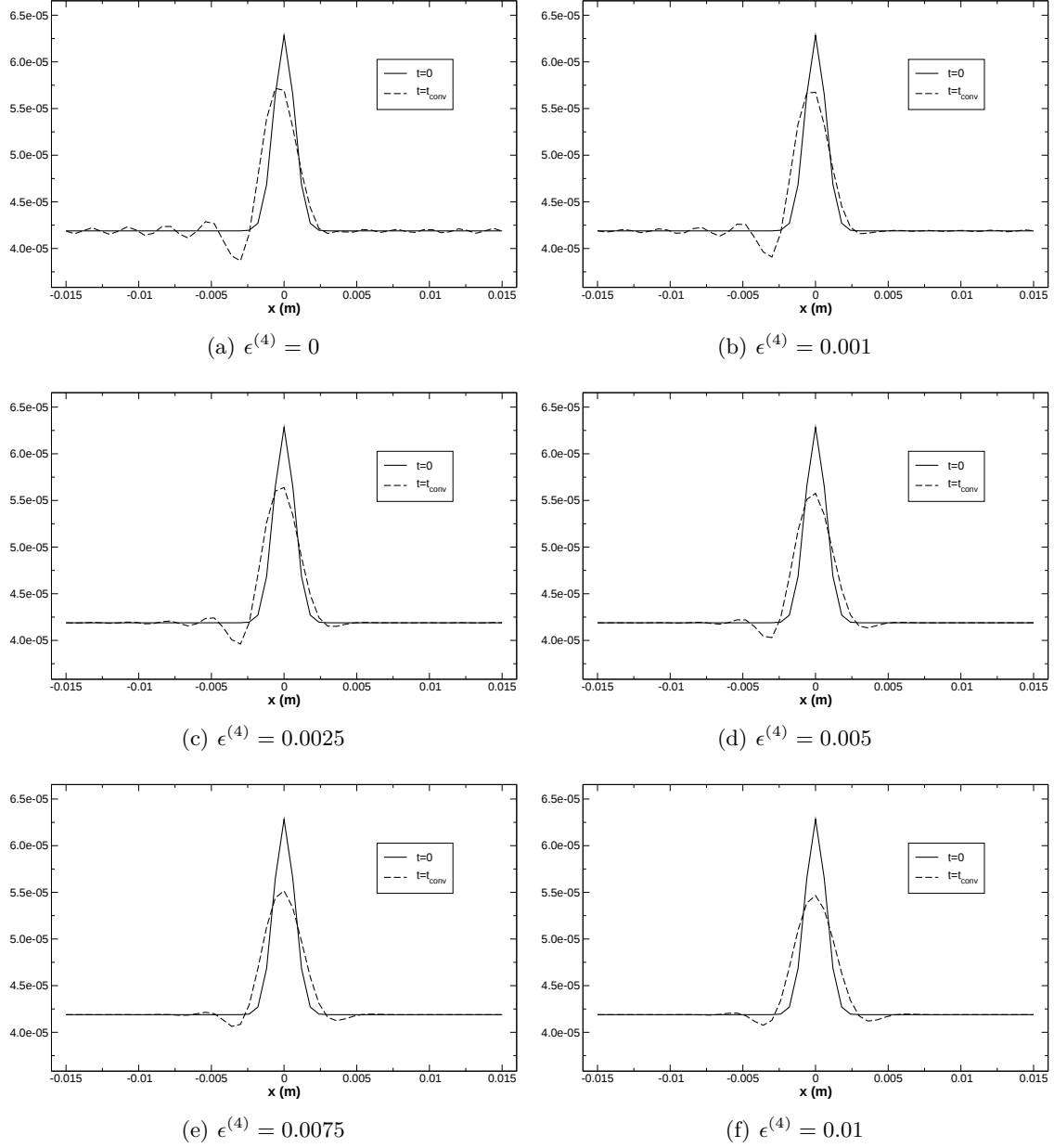


FIG. 5.9: Mise en évidence de l'effet de la viscosité artificielle de 4^{ème} ordre. Le maillage utilisé a 50 cellules, la stratégie numérique employée correspond au schéma TTGC avec le senseur CMS d'application, et le paramètre utilisateur $\epsilon^{(2)} = 0.3$.

de 100 cellules semble être pour des valeurs plus faibles $\epsilon^{(4)} \in [0, 0.002]$. Rappelons que l'hyperdiffusion est activée sur l'ensemble du domaine, sauf là où la diffusion d'ordre 2 agit, *via* le paramètre $\epsilon^{(4*)}$ défini par l'Eq. (5.5). Ainsi sur le maillage fin cet opérateur est activé plus souvent et influence *a priori* de manière plus importante la précision du schéma numérique.

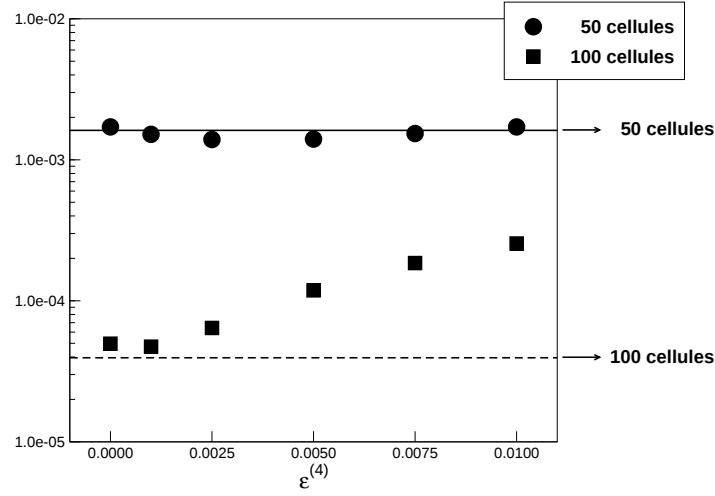


FIG. 5.10: Mesure de l'erreur $\mathcal{E}$ obtenue en employant le schéma TTGC et de la viscosité artificielle appliquée par le senseur CMS. Les lignes horizontales correspondent à l'erreur du schéma seul, les symboles correspondent à l'erreur de l'ensemble schéma plus viscosité artificielle en fonction de la valeur du paramètre $\epsilon^{(4)}$.

En conclusion, la stratégie numérique { TTGC, viscosité et hyperviscosité artificielles, senseur d'application CMS } semble être bien adaptée pour résoudre les forts gradients présents dans les calculs diphasiques instationnaires. Les paramètres utilisateurs et principalement¹² le $\epsilon^{(4)}$ doivent être choisis les plus petits possibles pour minimiser la diffusion numérique et suffisamment élevés pour amortir efficacement les oscillations secondaires liées à la dispersion importante du schéma centré. Les paramètres utilisés dans la configuration 3D MERCATO, (cf. Chapitre 9 §-9.1.5) ont été choisis en accord avec ces résultats.

¹²car l'opérateur d'hyperviscosité n'est pas appliqué ponctuellement mais sur l'ensemble du domaine.

5.3 Capture de fronts

5.3.1 Limitation des schémas centrés

La section précédente a permis de montrer que la stratégie numérique TTGC_AV_3 { TTGC, viscosité et hyperviscosité artificielles, senseur d'application CMS } était adaptée, en terme de précision et de robustesse, pour résoudre les forts gradients qui apparaissent dans les simulations instationnaires avec l'approche Euler-Euler. Un cas test qui conduit à la formation d'un δ -choc va permettre d'évaluer la robustesse de cette stratégie. Comme l'explique De Chaisemartin (2009) dans sa thèse, un δ -choc est formé dans une simulation Euler-Euler lorsque la physique de l'écoulement simulé ne respecte plus l'hypothèse d'unicité de la vitesse mésoscopique locale. Sur la configuration mono-dimensionnelle utilisée à la section 5.2, une perturbation gaussienne est initialisée à la fois sur la fraction volumique (à diamètre constant), et la vitesse. Ce cas test se veut représentatif de ce qui est rencontré dans les calculs diphasiques de configuration réelle. La variation spatiale de vitesse rompt la linéarité du problème décrit par l'équation Eq. (5.4). Les équations Eq. (5.1) et Eq. (5.2) peuvent se recombinaer pour donner une équation similaire à l'équation de Burgers pour la phase gazeuse :

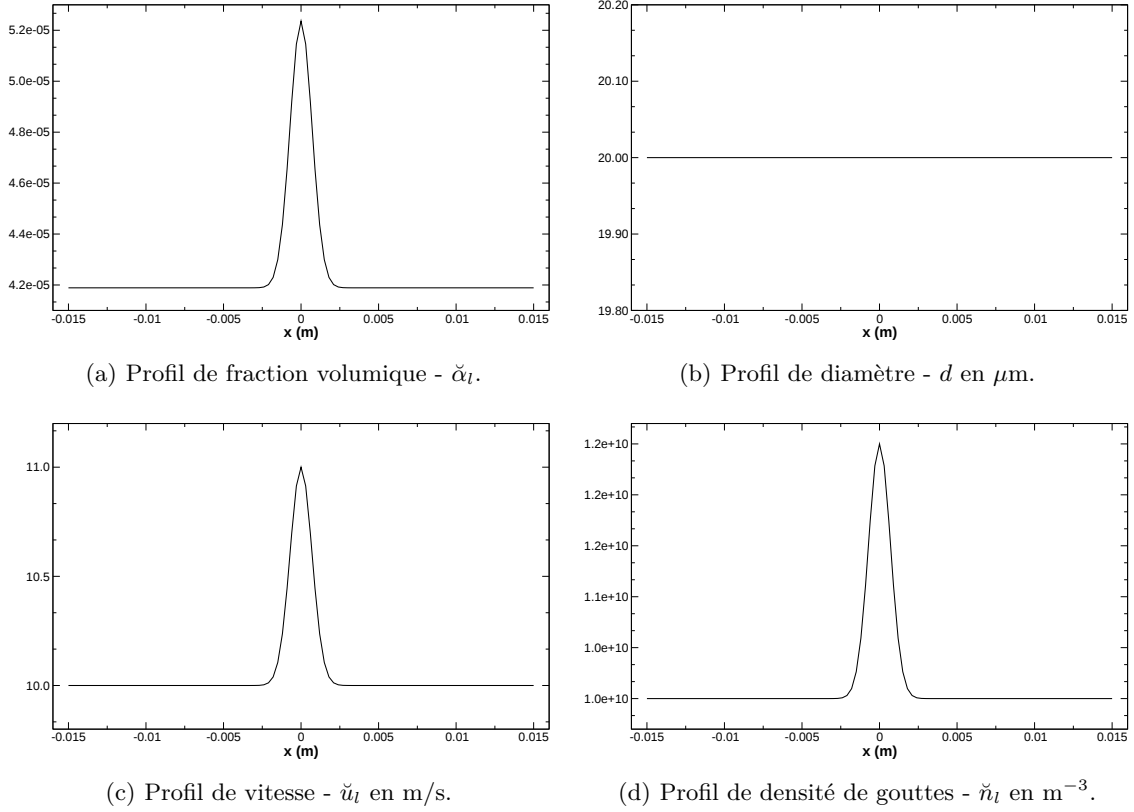
$$\frac{\partial}{\partial t} \check{u}_l + \check{u}_l \frac{\partial}{\partial x} \check{u}_l = 0 \quad (5.23)$$

L'Eq. (5.23) est une équation de conservation hyperbolique. Il s'agit d'un problème aux conditions initiales. La non-linéarité introduite par le terme de conservation est susceptible de générer des chocs selon le choix de la condition initiale (Desprès & Dubois, 2005; Hirsch, 1990).

La solution initiale est présentée Fig. 5.11. Un profil gaussien est initialisé sur la fraction volumique dont l'amplitude correspond à 25% de la valeur initiale et sur la vitesse de convection dont l'amplitude correspond à 10 % de la valeur. Le diamètre est gardé constant, ce qui entraîne un profil gaussien sur le profil de densité volumique de liquide. Les gouttes plus rapides (au centre du signal gaussien) vont avoir tendance à rattraper les gouttes moins rapides. Les gouttes ne peuvent pas se dépasser car il ne peut exister en un point qu'une seule vitesse *mésoscopique*, et auront donc tendance à s'accumuler en aval de la perturbation. Cette accumulation conduira à un effet de moyenne sur le profil de vitesse.

Le cas test est réalisé sur le maillage à 50 cellules et à 100 cellules. Les paramètres utilisateurs pour l'application de la viscosité artificielle sont fixés à : $\epsilon^{(2)} = 0.3$ et $\epsilon^{(4)} = 0.005$. Les profils obtenus après 1, 2, 3 et 4 temps convectif t_{conv} sont présentés Fig. 5.12. Sur le maillage à 100 cellules, la simulation échoue après un peu plus d'un temps convectif.

Comme attendu, les profils de fraction volumique et de densité volumique de gouttes présentent une accumulation de liquide en aval de la position initiale de la perturbation. En amont de la position initiale de la perturbation, une zone de vide de gouttes se forme. Le profil de vitesse s'étale sur la largeur du creux et du pic de densité de gouttes. Il est très mal résolu par le schéma. Avec le raffinement du maillage, l'accumulation de gouttes se fait sur une épaisseur plus mince. Le maximum après un temps convectif obtenu sur le maillage raffiné est plus grand que le maximum après 4 temps convectif sur le maillage


 FIG. 5.11: *Solution initiale du cas test non-linéaire.*

grossier. Le minimum sur le maillage fin dans la zone de vide est également plus faible que sur le maillage grossier. La solution obtenue est donc dépendante du maillage : le δ -choc s'amincit autant que le maillage le permet. Sur le maillage fin, le calcul diverge car la fraction volumique de liquide devient ponctuellement négative, ce qui n'est pas physique.

Pour stabiliser le calcul, il devient alors nécessaire de forcer la fraction volumique et la densité de goutte à rester au dessus d'une valeur seuil. On parle alors de *clipping*. Les résultats obtenus sur le maillage de 100 cellules, avec les valeurs seuils ci-dessous, sont présentés sur la Fig. 5.13.

$$\alpha_{l,\text{clipping}} = 4.2 \times 10^{-10} \quad \text{et} \quad n_{l,\text{clipping}} = 1 \times 10^5 \text{ m}^3 \quad (5.24)$$

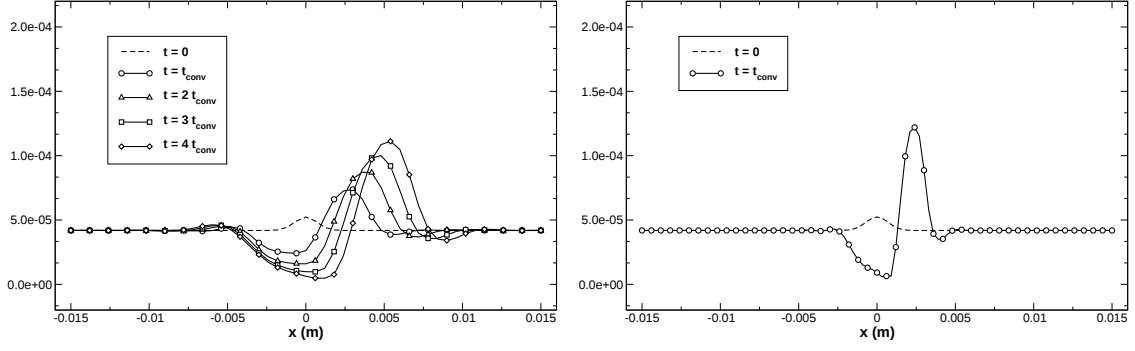
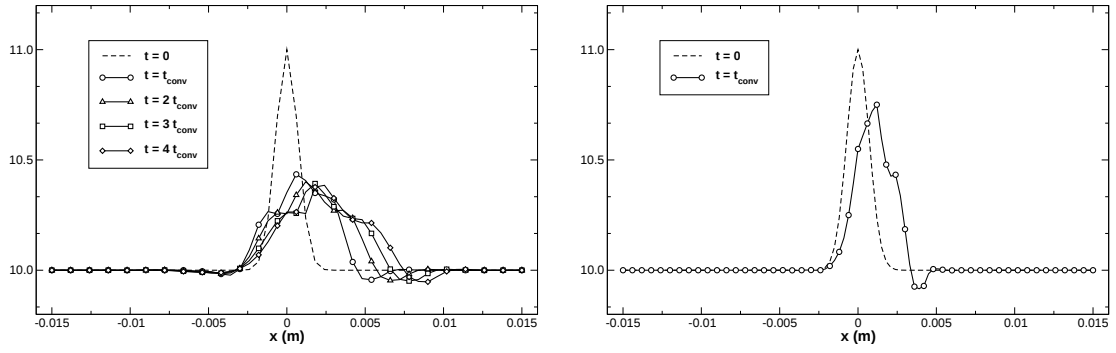
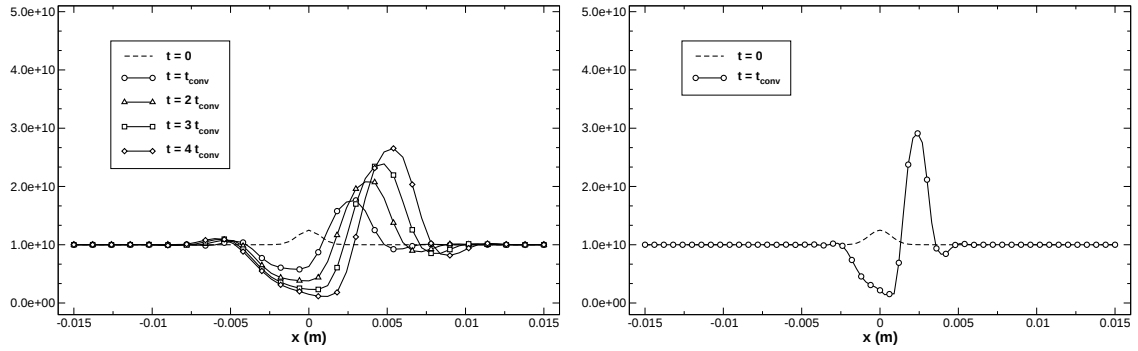
(a) Profils de fraction volumique - $\tilde{\alpha}_l$.(b) Profils de vitesse - $\tilde{u}_l$ en m/s.(c) Profils de densité de gouttes - $\tilde{n}_l$ en m^{-3} .

FIG. 5.12: Cas test non-linéaire avec la stratégie numérique TTGC_AV_3. À gauche, profils obtenus sur le maillage à 50 cellules, à droite sur le maillage à 100 cellules.

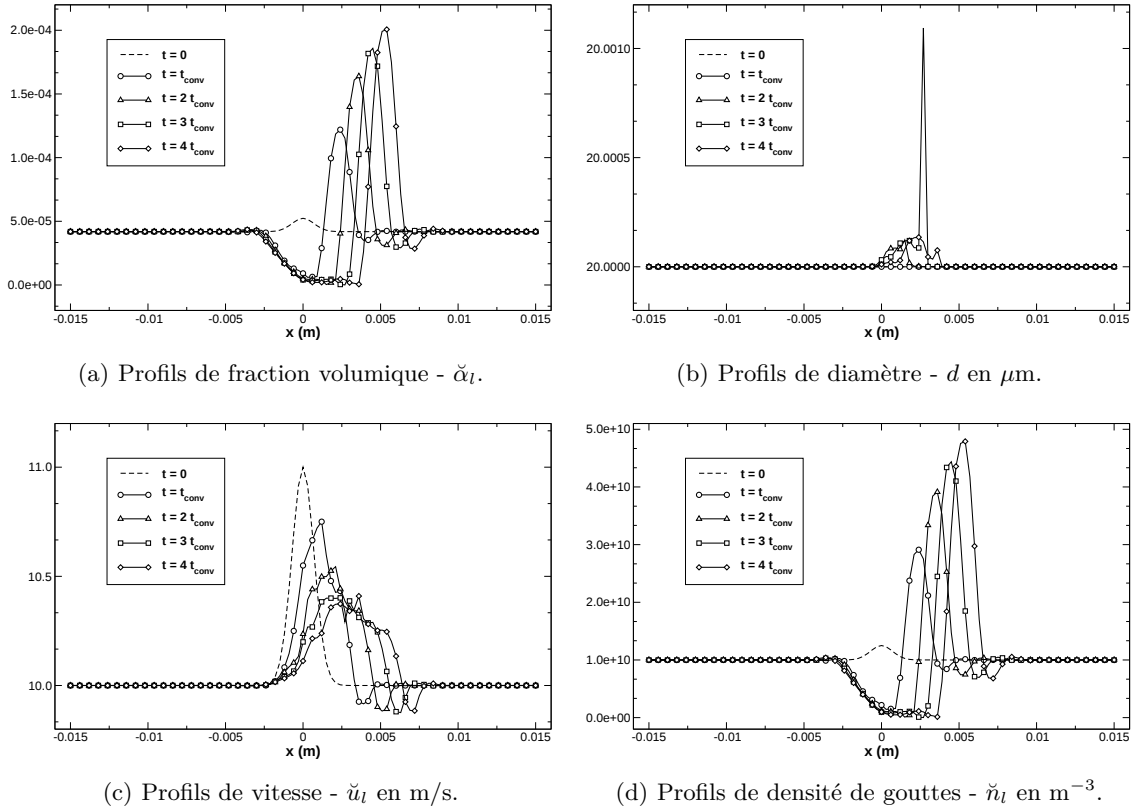
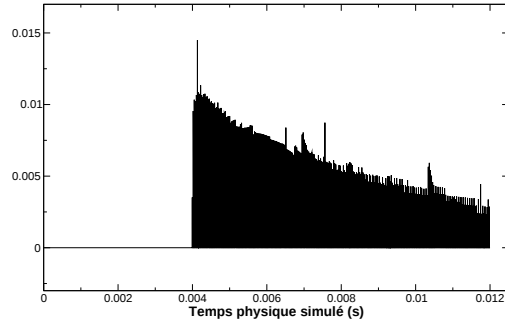


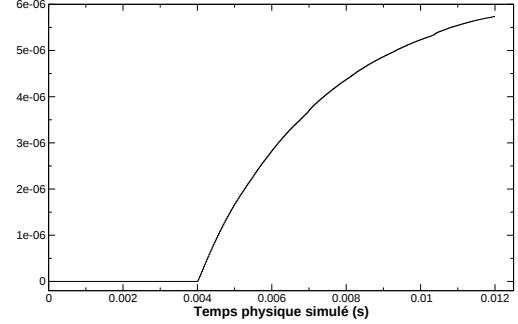
FIG. 5.13: Profils obtenus sur le maillage de 100 cellules en forçant la fraction volumique et la densité volumique de gouttes au dessus de valeurs seuils données Eq. (5.24).

Si le *clipping* permet de stabiliser le calcul sans trop créer d'oscillations parasites sur les profils de fraction volumique et de densité volumique de gouttes, des erreurs de reconstruction sur le diamètre apparaissent. Ces erreurs restent tout de même négligeables. La variation de masse liée à cet artefact numérique peut être suivie au cours du calcul, et est présentée pour le cas test Fig. 5.14. La limitation des valeurs de fraction volumique et de densité de goutte ne s'active pas immédiatement, elle démarre après 0.004 s de temps physique lorsque la zone de vide devient trop forte. Au cours du calcul, la variation de masse liée à ce limiteur diminue, le limiteur est efficace.

Ce cas test a mis en évidence les difficultés du schéma centré à résoudre les δ -chocs qui peuvent apparaître dans les simulations numériques sur des configurations réelles. La viscosité artificielle permet de bien résoudre les fronts de fraction volumique et de densité volumique de gouttes, mais elle ne parvient pas à lisser le profil de vitesse qui suit l'équation de Burgers (Eq. (5.23)). Il faut en outre recourir à une limitation des valeurs minimales de fraction volumique et de densité de gouttes. Ainsi la stratégie numérique qui consiste à employer le schéma centré TTGC requiert au moins 4 paramètres qui doivent être fixés par l'utilisateur : $\epsilon^{(2)}$, $\epsilon^{(4)}$, $\alpha_{l,\text{clipping}}$, $n_{l,\text{clipping}}$. Ces paramètres, loin d'être universels, dépendent de la résolution spatiale et du problème résolu ! De plus cette stratégie n'assure pas une grande robustesse : l'utilisateur n'est jamais à l'abri de voir son calcul échouer



(a) Variation de masse en kg/s dans le domaine.



(b) Masse ajoutée cumulée en kg dans le domaine.

FIG. 5.14: *Bilan de masse sur le domaine au cours de la simulation.*

à cause d'une zone de vide qui génère des fractions volumiques non physiques. Pour ces raisons, les développements actuels d'AVBP portent sur l'amélioration de la robustesse et l'implantation de schémas spécifiques à la résolution des équations de la phase dispersée.

5.3.2 Schémas adaptés à la simulation de la phase dispersée

Il existe plusieurs méthodes numériques qui permettent d'augmenter la robustesse des simulations. Dans sa thèse Lamarque (2007) en donne un aperçu :

- Schémas conservatifs dits cinétiques
Ces schémas réalisent l'avancement des moments définis dans l'espace physique en passant par l'espace des phases. La fonction de distribution est présumée et son avancement temporel est alors exact. Cette approche assure une stabilité linéaire et non-linéaire du calcul. Ce type de schéma a été utilisé par De Chaisemartin (2009) dans ses travaux de thèse.
- Schémas amont d'ordre élevé avec limiteur de flux
Ils permettent de cumuler précision, grâce à l'utilisation de flux élevés, et robustesse, grâce au limiteur de flux.
- Schémas amont à résidus distribués
Les résidus sont distribués dans le sens de la propagation de l'information, les phénomènes de dispersion sont limités.

Ces schémas ne sont pas tous adaptés pour le code AVBP. En effet ils emploient souvent des *stencils* larges et les procédures éléments finis sont parfois difficiles à étendre à tous les types d'éléments et à la gestion des métriques dans AVBP. Néanmoins le travail collaboratif de Lamarque (2007) et Roux (2009) a permis de tester plusieurs schémas à résidus distribués. L'avantage de cette méthode est d'être compatible avec la structure de données

liée à la méthode *cell-vertex* : seule la distribution du résidu sur les noeuds de maillage est modifiée. Ces schémas dits *décentrés* redistribuent le résidu, en fonction du sens de l'écoulement, sur les noeuds placés en aval des cellules. Parmi plusieurs schéma étudiés, le schéma PSI est le seul à posséder les propriétés de positivité (robustesse) et de préservation de la linéarité des solutions (précision). Ce schéma a donc été récemment intégré dans AVBP par Roux (2009) et Kraushaar (2011). Le schéma PSI, décentré, présente d'excellentes qualités en terme de robustesse. Malheureusement il présente une forte dissipation dans le sens de l'écoulement qui en limite la précision à l'ordre 1 en temps et en espace (Lamarque, 2007).

Les cas tests réalisés §-5.2.1 et §-5.3.1 sont reproduits avec le schéma PSI sans activer les opérateurs de viscosité artificielle. Les résultats sont maintenant reproduits pour les deux maillages de 50 et 100 cellules sur les Figs. 5.15 et 5.16 avec les mêmes échelles que les Figs. 5.3, 5.4, 5.5 et 5.6 pour comparaison sur le cas test linéaire et Fig. 5.12 pour comparaison sur le cas test non-linéaire.

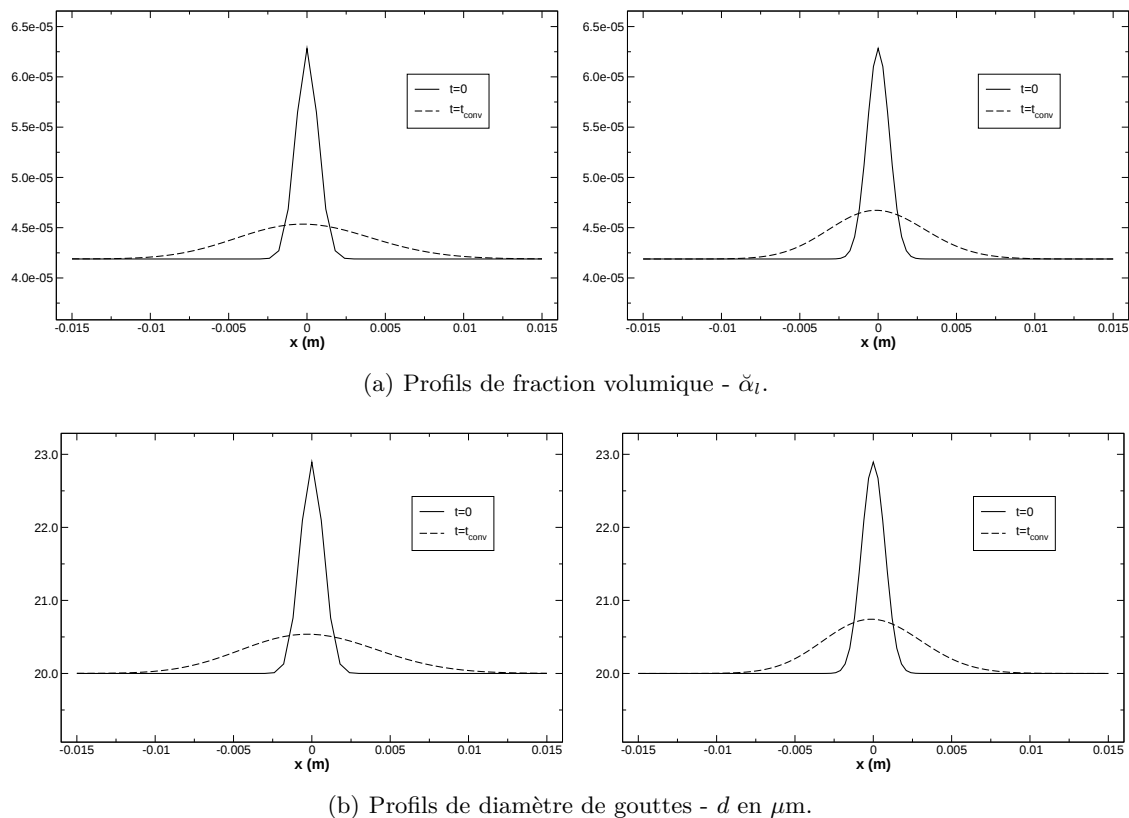


FIG. 5.15: **Cas test linéaire** : mise en évidence de la dissipation du schéma PSI et de son effet sur la reconstruction du diamètre des gouttes après un temps convectif. À gauche, résolution sur le maillage de 50 cellules, à droite sur celui de 100 cellules.

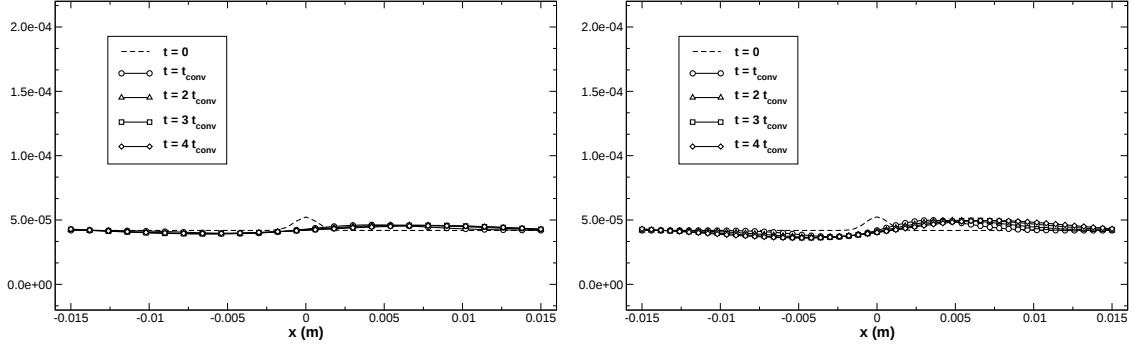
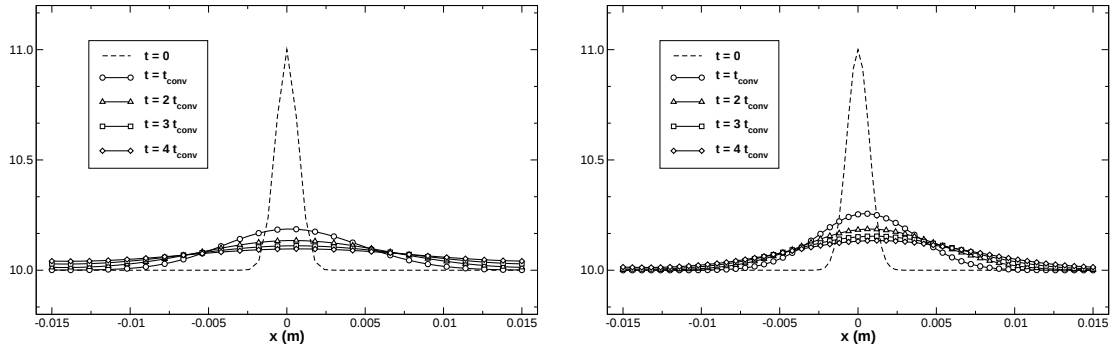
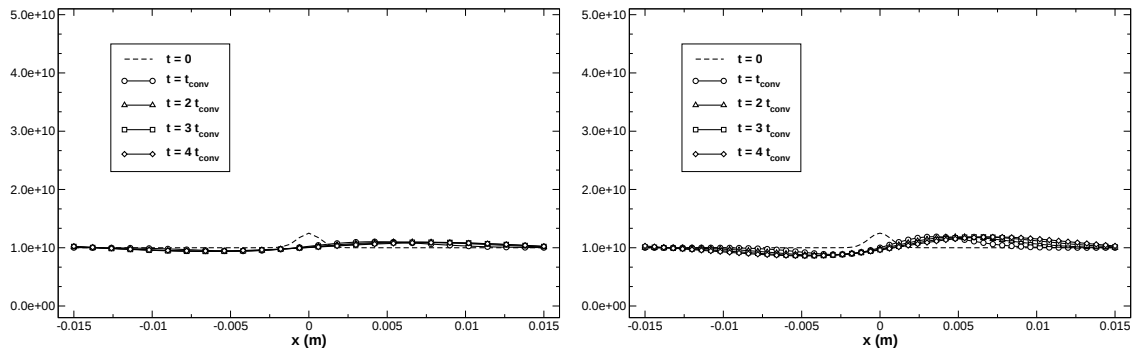
(a) Profils de fraction volumique - α_l .(b) Profils de vitesse - $\tilde{u}_l$ en m/s.(c) Profils de densité de gouttes - $\tilde{n}_l$ en m $^{-3}$.

FIG. 5.16: **Cas test non-linéaire** : évaluation de la robustesse du schéma PSI. À gauche, profils obtenus sur le maillage à 50 cellules, à droite sur le maillage à 100 cellules.

La dissipation du schéma est tellement forte que pour le cas test conduisant à l'accumulation de gouttes (Fig. 5.16), les *maxima* obtenus sur les profils de fraction volumique et de densité de gouttes sont inférieurs à la perturbation initiale ! Sur le maillage à 50 cellules le profil de vitesse n'est pas convecté, sur le maillage à 100 cellules, l'étalement du profil dans le sens de l'écoulement est à peine perceptible.

La force du schéma PSI est sa robustesse et on peut donc raffiner le maillage, sans que cela ne pose un quelconque problème pour la résolution. Le δ -choc mis en évidence avec le schéma TTGC est alors de mieux en mieux résolu. La Fig. 5.17 montre les résultats obtenus avec le schéma PSI sur un maillage de 500 cellules et de 1000 cellules. La forme des solutions obtenues est proche de la forme des solutions obtenues avec le schéma TTGC sur les mailles de 50 et 100 cellules.

Le schéma numérique PSI nouvellement intégré dans AVBP, assure sa mission de robustesse. Malheureusement la forte dissipation impose d'utiliser PSI sur des maillages très raffinés pour assurer la précision. Il est intéressant d'évaluer la performance de cette stratégie pour la simulation d'une configuration complexe et réaliste. C'est pourquoi cette stratégie a été portée sur la simulation du banc MERCATO. Les résultats du schéma PSI, seront comparés aux résultats des calculs TTGC au Chapitre 10.

La solution prometteuse retenue par Lamarque (2007) et Roux (2009) pour pallier le manque de précision du schéma PSI et le manque de robustesse des schémas centrés consiste à combiner les deux schémas numériques selon la méthode FCT pour *Flux-Corrected Transport*¹³. La solution testée dans (Roux, 2009) consiste à utiliser le schéma Lax-Wendroff¹⁴ comme schéma haut-ordre et le schéma PSI comme schéma bas-ordre. Le schéma bas-ordre permet de construire une référence pour assurer la positivité du schéma. Le flux prédit par le schéma bas-ordre est alors corrigé par un flux anti-diffusif construit à partir du schéma haut-ordre. Celui-ci est contrôlé par un limiteur afin de garantir la robustesse du schéma global. Cette procédure, décrite dans (Roux, 2009), permet d'obtenir un schéma dont la précision est donnée par le schéma haut-ordre et la robustesse par le schéma bas-ordre. Elle a été mise en oeuvre sur la configuration MERCATO par Roux (2009). Malheureusement, elle est très coûteuse en temps de calcul et nécessite un plus de mémoire que les méthodes actuellement implantées dans AVBP. En effet, en chaque point, l'avancement temporel est calculé avec les deux schémas numériques pour construire le flux anti-diffusif et l'avancement temporel du schéma global. Ce schéma numérique demande encore des améliorations avant d'être intégré dans AVBP. C'est pourquoi il n'a pas été testé dans ce travail de thèse.

¹³transport de flux corrigé, en français.

¹⁴schéma du 2nd ordre en temps et en espace, dont les caractéristiques sont notées LW sur la Fig. 5.2.

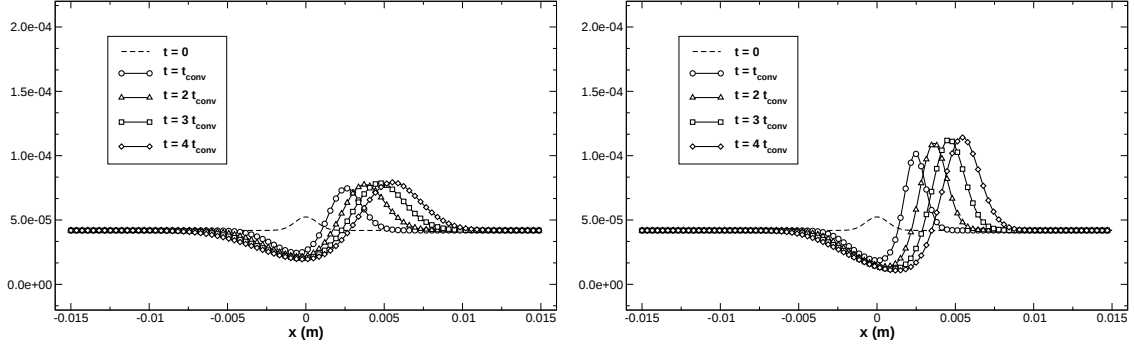
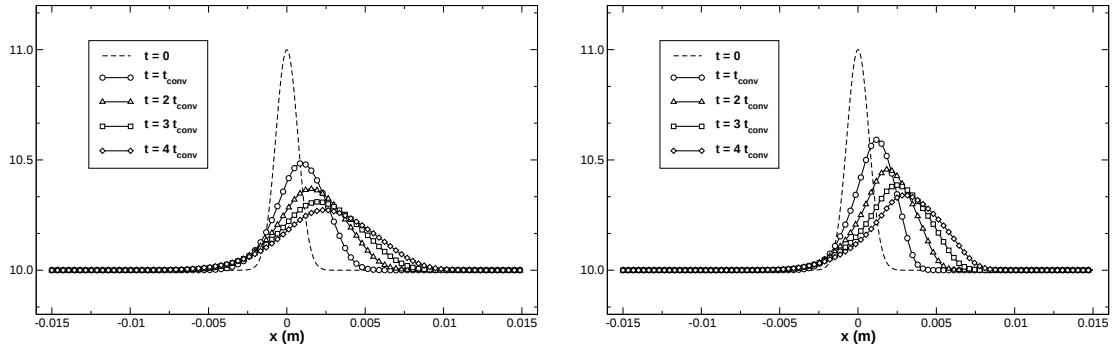
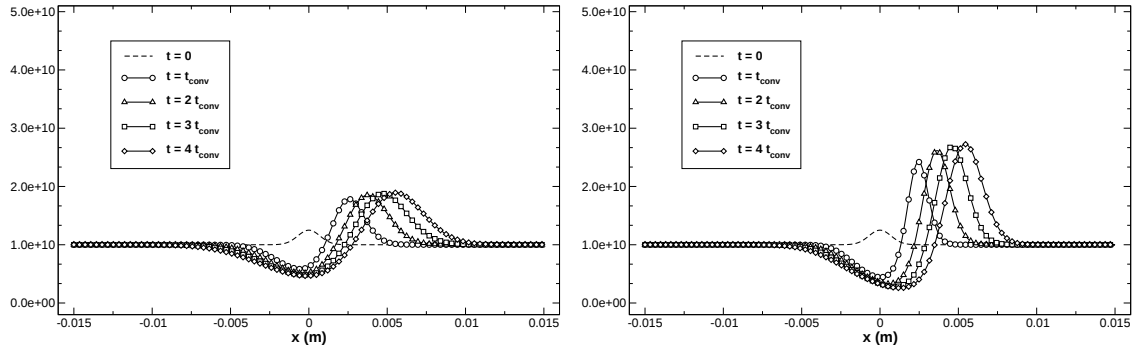
(a) Profils de fraction volumique - α_l .(b) Profils de vitesse - $\tilde{u}_l$ en m/s.(c) Profils de densité de gouttes - $\tilde{n}_l$ en m^{-3} .

FIG. 5.17: **Cas test non-linéaire** : évaluation de la robustesse du schéma PSI. À gauche, profils obtenus sur le maillage à 500 cellules, à droite sur le maillage à 1000 cellules.

Troisième partie

Modélisation de la physique des écoulements diphasiques : évaporation et injection

Introduction

Cette partie du manuscrit réunit deux études relatives à des aspects physiques essentiels des simulations diphasiques pour les chambres de combustion. L'étude du Chapitre 6 évalue le modèle d'évaporation retenu dans AVBP, qui a été présenté au §-3.2.4. Tout d'abord il s'agit de situer le modèle en terme d'hypothèses, de physique résolue ou négligée et de performances numériques. Ensuite une étude de sensibilité des paramètres de thermodynamique et de transport intervenant dans le modèle est réalisée. Enfin une modélisation du carburant *kérosène* est proposée et évaluée. Le Chapitre 7 présente une méthodologie développée pour prendre en compte, dans un code adapté aux écoulements dispersés, l'injection de carburant liquide par un atomiseur pressurisé-swirlé. La mise en oeuvre de la méthodologie dans une géométrie complexe est également présentée.

Chapitre 6

Évaluation du modèle d'évaporation d'AVBP et application au kérosène

Sommaire

6.1	Présentation des différentes modélisations pour l'évaporation	112
6.1.1	Description du procédé d'évaporation	112
6.1.2	Diffusion dans la phase gazeuse (1 & 4)	112
6.1.3	Diffusion thermique dans la goutte (2)	113
6.1.4	Modélisation de l'interface gaz-liquide (3)	117
6.1.5	Limitations	117
6.2	Évaluation du modèle retenu dans AVBP	118
6.2.1	Formulations pour l'évaluation des propriétés du mélange gazeux	119
6.2.2	Evaporation de gouttes isolées de n-heptane	122
6.3	Modélisation du kérosène liquide	129
6.3.1	Propriétés thermodynamiques du KERO_LUCHE	130
6.3.2	Propriétés diffusives	130
6.3.3	Propriétés du liquide	130
6.4	Évaluation de la modélisation du kérosène en évaporation	131
6.4.1	Évaluation de la vitesse de régression de la surface des gouttes de kérosène	131
6.4.2	Évaluation des temps caractéristiques du processus d'évaporation pour le kérosène	131

6.1 Présentation des différentes modélisations pour l'évaporation

6.1.1 Description du procédé d'évaporation

Dans cette section, un aperçu des différents degrés de modélisation du procédé d'évaporation est présenté pour comprendre les choix de modélisation faits dans AVBP et connaître les limitations du modèle décrit au paragraphe §-3.2.4. De nombreuses revues et comparaisons des différents modèles d'évaporation peuvent être trouvées dans la littérature (Miller *et al.*, 1998; Sirignano, 1999; Sazhin, 2006; Sazhin *et al.*, 2006; Laurent, 2008).

L'évaporation de gouttes de liquide dans un gaz peut être décomposé en différents phénomènes physiques successifs et/ou coexistants :

1. *Diffusion de la chaleur du gaz vers la surface de la goutte*

L'énergie nécessaire pour l'évaporation du carburant est apportée par le gaz environnant les gouttes. La chaleur est diffusée du gaz vers la surface de la goutte. D'autres effets comme le rayonnement peuvent également contribuer à fournir l'énergie nécessaire à la goutte pour s'évaporer.

2. *Diffusion de la chaleur dans la goutte*

Le flux de chaleur reçu par la goutte via la surface d'échange se diffuse progressivement dans la goutte. La température à l'intérieur de la goutte augmente.

3. *Processus de vaporisation*

Les molécules de carburant se détachent de l'interface liquide/gaz pour rejoindre la phase gazeuse.

4. *Diffusion du carburant de la surface de la goutte vers le gaz*

Les molécules de carburant à l'état gazeux formées à la surface de la goutte sont transportées vers le gaz environnant.

Un modèle d'évaporation correspond à un choix de modélisation pour chacun de ces phénomènes physiques (Sazhin, 2006). Les phénomènes de transports thermique et massique dans la phase gazeuse dépendent du type d'écoulement qui s'établit autour des gouttes et des propriétés de transport du carburant dans le gaz et des conditions (température et composition) loin de la goutte. De la même façon, la diffusion thermique dans la goutte dépend de l'écoulement dans la goutte et des propriétés de transport du carburant. Enfin plusieurs hypothèses peuvent être faites sur l'état de l'interface gaz-liquide.

6.1.2 Diffusion dans la phase gazeuse (1 & 4)

La plupart des modèles d'évaporation suppose que le problème de diffusion dans le gaz est à symétrie sphérique : les gouttes sont indéformables et le gaz est immobile dans le référentiel lié au centre de la goutte. Les effets de convection naturelle ou forcée peuvent modifier l'écoulement autour de la goutte. Une couche limite peut alors se former en amont de la goutte et se décoller en aval. Les modèles de diffusion dans le gaz peuvent être classés selon la hiérarchie suivante :

1. *Modèle à symétrie sphérique*¹

Le gaz est immobile autour de la goutte. Des corrélations prenant en compte le Reynolds particulière des gouttes, peuvent modifier les coefficients de Nu et Sh qui mesurent l'efficacité des échanges thermique et massique, respectivement, autour de la goutte.

2. *Modèle de couche limite*

Il s'agit d'un modèle à symétrie sphérique mais l'effet de la couche limite autour de la goutte soufflée par la vapeur de carburant est pris en compte² via des facteurs de correction (Abramzon & Sirignano, 1989; Yao *et al.*, 2003).

3. *Résolution de l'écoulement autour des gouttes*

L'écoulement gazeux est résolu autour de la goutte sphérique afin de prédire localement les flux thermique et massique près de la surface de la goutte (Sirignano, 1999). Zhu *et al.* (2001) ont montré que les effets de non-stationnarité de l'écoulement gazeux pouvaient augmenter très fortement le taux d'évaporation dans des conditions de pression élevées.

Pour simplifier la résolution des équations de diffusion thermique et moléculaire, dans la majorité des modèles rencontrés dans la littérature, les propriétés de transport sont supposées constantes entre la surface de la goutte et l'écoulement à l'infini, cf. §-3.2.4. Il faut garder à l'esprit que l'évaluation du flux de chaleur apporté à la goutte et du flux de masse évaporé dépend fortement de l'évaluation de ces coefficients (Miller *et al.*, 1998). Cette dépendance sera étudiée à la section suivante.

6.1.3 Diffusion thermique dans la goutte (2)

Dans les codes de CFD, l'écoulement dans la goutte est très souvent négligé et la diffusion thermique dans la goutte est centripète. Il existe également des modèles qui prennent en compte la formation de deux zones contrarotatives liées au cisaillement à la surface de la goutte du à l'écoulement externe. Les modèles de diffusion de température dans la goutte suivent la hiérarchie suivante :

¹Il s'agit du modèle implanté dans AVBP, cf. §-3.2.4.

²En anglais, on parle de *film-theory*.

1. *Modèle à température constante*

La température dans la goutte est supposée constante dans le temps et l'espace. L'intégralité de l'énergie apportée par le gaz sert au processus d'évaporation. Si les conditions à l'infini sont supposées constantes (température du gaz environnant et concentration du carburant dans le gaz environnant) alors on obtient que la variation de la surface de la goutte est linéaire dans le temps : il s'agit de la *loi du d^2* : l'évolution temporelle de la surface de la goutte est linéaire. La température de la goutte est nécessairement la température dite *humide* ou température *wetbulb* en anglais, notée T_{wb} .

2. *Modèle à diffusion infinie³*

Ce modèle suppose que la diffusion de la chaleur est infiniment rapide comparée aux autres phénomènes en jeu dans le processus d'évaporation, énumérés §-6.1.1. La température de la goutte s'équilibre instantanément dans tout le volume de la goutte et peut différer de la valeur T_{wb}

3. *Modèle à profil de température polynomial*

L'écoulement dans la goutte est négligé et le profil de température dans la goutte est présupposé sous forme polynomiale. Cela ramène la résolution de l'équation dérivée partielle de la chaleur dans la goutte à la résolution d'une équation polynomiale (Sazhin *et al.*, 2005; Laurent, 2008).

4. *Modèle à diffusion limitée*

L'écoulement est négligé dans la goutte, la diffusion thermique est centripète. L'équation de la chaleur est résolue dans le temps en fonction de la coordonnée radiale.

5. *Modèle à diffusion effective*

L'écoulement dans la goutte est négligé mais son effet sur le coefficient de diffusion thermique du liquide est considéré. Ainsi la diffusion thermique est à symétrie radiale et le coefficient de diffusion est multiplié par un facteur correctif lié au nombre de Peclet⁴ de la goutte.

6. *Modèle du Vortex de Hill*

La forme de l'écoulement dans la goutte est présupposée. Le champ de vitesse prend une forme torique définissant le *Vortex de Hill* schématisé à la Fig. 6.1. L'équation de la chaleur est résolue en coordonnées cylindriques (Abramzon & Sirignano, 1989).

7. *Résolution de l'écoulement*

En simulation directe, les équations de la dynamique et de la thermique dans la goutte peuvent être résolues. Les irrégularités de température de surface peuvent être alors prises en compte (Rangel & Sirignano, 1989).

³Il s'agit du modèle retenu dans AVBP. Rappelons que cette hypothèse vient du choix des variables de la *pdf* pour décrire la phase dispersée, cf. §-3.1.2.

⁴Le nombre de Peclet $Pe_L = \frac{U_s d}{\alpha} = Re_L \cdot Pr_L$ mesure le rapport entre le transport par convection et par conduction thermique au sein de la goutte, avec U_s la vitesse de glissement du liquide à la surface de la goutte.

correlation is examined, for which the factor $f(Re, Pr)$ is given by

$$f(Re, Pr) = 1 + 0.3 Re^{1/2} Pr^{1/3} \quad (6)$$

Although this type of correlations is very simple, there is really very little theoretical justification for them. Moreover, these correlations are based on experiments conducted under quasisteady conditions. As mentioned previously, there is a transient droplet heating stage and during that period the quasisteadiness assumption for the liquid phase is invalid. Indeed, Sirignano¹⁰ showed, through theoretical analysis,

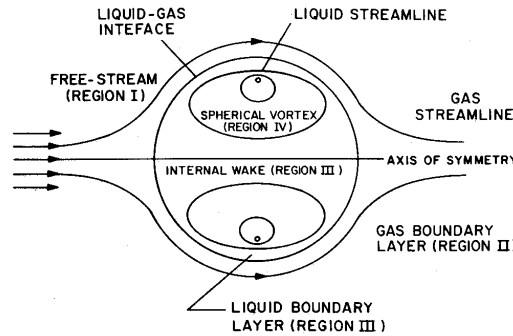


Fig. 1 Flow regions outside and within a fuel droplet at high Reynolds number.

FIG. 6.1: Écoulement à grande vitesse de Reynolds particulaire, Re_p , autour d'une goutte et à l'intérieur de la goutte.

Tong and Sirignano's Axisymmetric Model

Tong and Sirignano¹⁵ further developed a one-dimensional gas-phase model. They simplified the axisymmetric convective analysis in the gas phase by representing the heat- and mass transfer rates by an optimum average for the stagnation point region and the shoulder region of a droplet. The results from coupling this simplified gas-phase model to their simplified liquid-phase model which was obtained earlier are in reasonably good agreement with the results of the more detailed model of Prakash and Sirignano. The gas-phase model has been employed in the spray calculations reported

Abramzon & Sirignano (1989) ont réalisé une étude comparative des différentes modélisations de la phase liquide : les résultats sont reproduits sur la Fig. 6.2.

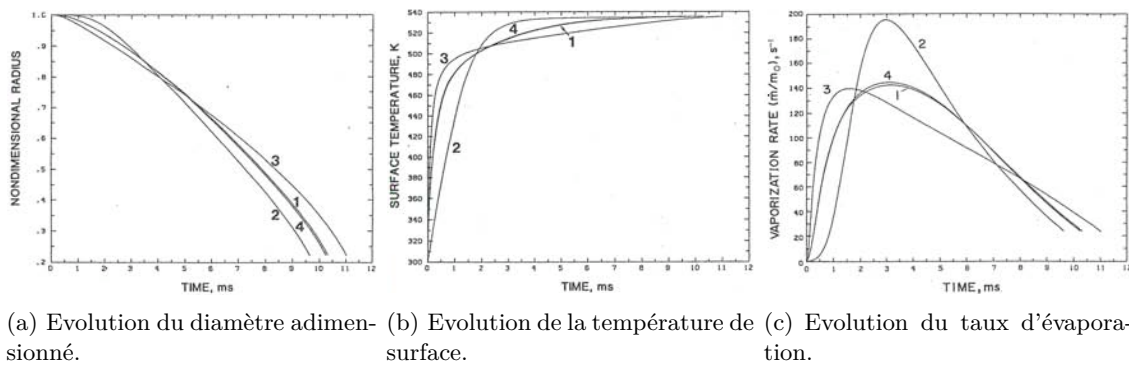


FIG. 6.2: Extraits de (Abramzon & Sirignano, 1989) - Comparaison de différents modèles pour la diffusion dans une goutte de *n*-decane : 1- résolution complète de l'écoulement et de la thermique dans la goutte, 2 - modèle à diffusion infinie, 3 - modèle à diffusion limitée, 4 - modèle à diffusion effective.

La prise en compte de l'évolution de la température dans la goutte **1** permet de mieux prédire l'évolution de la température de surface Fig. 6.2(b). Le modèle à diffusion limitée **3** prédit une évolution de la température de surface initialement très rapide mais l'équilibre thermique est atteint au cours d'un temps très long, car le flux thermique reçu pénètre lentement jusqu'au centre la goutte. Ceci limite alors l'énergie disponible pour l'évaporation Fig. 6.2(c). Le modèle à diffusion infinie prédit une évolution de la température de surface trop lente car le flux de chaleur reçu chauffe de manière générale tout le volume de la goutte. En revanche, lorsque la température d'équilibre est atteinte, toute l'énergie apportée par le gaz est disponible pour l'évaporation, conduisant à un fort taux d'évaporation. Le modèle à diffusion effective **4** donne une évolution intermédiaire à ces deux modèles limites. En effet, l'écoulement dans la goutte tend à homogénéiser rapidement la température, limitant l'écart de température entre la surface et le centre de la goutte. Le temps d'évaporation obtenu avec le modèle à diffusion infinie est trop petit par rapport au temps prédit par l'approche complète **1**, tandis qu'il est trop grand avec le modèle à

diffusion limitée.

La répartition de température dans la goutte n'est pas en soit un paramètre important, en revanche, la température de surface doit être précisément estimée car elle pilote le taux d'évaporation. Le modèle à diffusion infinie, employé dans les calcul de cette thèse, est un excellent compromis (Sazhin *et al.*, 2006) entre précision, facilité d'implantation et rapidité d'exécution. Néanmoins lors de changements brusques de température, comme cela peut être le cas en combustion, et notamment lors d'un allumage ou d'un ré-allumage, la température de surface peut être très différente de la température au centre de la goutte. Dans ces cas très instationnaires, le modèle à diffusion infinie sous-estime le taux d'évaporation réel (Laurent, 2008).

6.1.4 Modélisation de l'interface gaz-liquide (3)

Deux types de modèles existent dans la littérature. Les modèles qui supposent que la concentration de vapeur de carburant à la surface atteint toujours l'état de saturation ou équilibre thermodynamique, sont les plus utilisés. Ils sont en effet les plus simples à implanter dans les codes de calcul CFD. Les autres, dit *hors-équilibre* tentent de décrire les mécanismes de détachement des molécules de l'interface.

1. *Modèles Hydrodynamiques*⁵

La fraction de vapeur à la surface de la goutte atteint la fraction de pression vapeur saturante. Dans le cas d'un mélange idéal de gaz parfaits, la loi de Clausius-Clapeyron ou une tabulation de la courbe de saturation permet de prédire cette fraction en fonction de la température de surface. La surface est dite à l'équilibre thermodynamique.

2. *Modèles cinétiques*

Pour les grands nombres de Knudsen^{6,7}, c'est-à-dire pour les petites gouttes $d < 50 \mu\text{m}$ (Miller *et al.*, 1998), des effets hors-équilibre peuvent apparaître. Ils sont modélisés par une approche cinétique, les molécules à la surface sont décrites par une approche *pdf* dont l'équation de transport de type Boltzmann est résolue ou modélisée par une distribution de Maxwell. Cette modélisation conduit à la loi de Langmuir-Knudsen (Sazhin, 2006; Miller *et al.*, 1998; Sazhin *et al.*, 2007).

3. *Simulation de dynamique moléculaire*

Les forces intermoléculaires sont modélisées par les potentiels de Lennard-Jones (Bird *et al.*, 2002), afin de calculer localement le coefficient d'évaporation qui apparaît dans les modèles cinétiques (Sazhin, 2006).

⁵Il s'agit de la modélisation retenue dans AVBP.

⁶Le nombre de Knudsen $Kn = \frac{l_{\text{coll}}}{R}$ compare le libre parcours moyen des molécules au rayon de la goutte, mesure la raréfaction en carburant de la couche de gaz entourant la goutte.

⁷Les nombres de Knudsen classiques dans les chambres de combustion sont généralement en dessous de 0.01 (Sazhin, 2006).

Les modélisations hors-équilibre apportent rapidement un niveau de complexité élevé, c'est pourquoi ils ne sont pas utilisés dans les codes de CFD. De plus les modèles cinétiques, même simples, dépendent de constantes difficilement mesurables, et reposent alors sur un paramètre supplémentaire qu'il faut fermer et qui apporte finalement une imprécision supplémentaire (Sazhin, 2006; Miller *et al.*, 1998).

6.1.5 Limitations

Lorsque le liquide évaporant est composé de plusieurs espèces, l'évaporation des différentes espèces n'est pas synchrone mais il se produit un effet de distillation c'est-à-dire une évaporation successive des différentes espèces en fonction de leur volatilité. Cet effet conduit à la modification progressive de la composition, et donc des propriétés de transport, de la vapeur entourant la goutte, mais également du liquide dans la goutte. Les modèles présentés peuvent s'étendre à l'évaporation de goutte multi-composants, soit en utilisant des modèles à composants discrets (Laurent, 2008), soit en utilisant des approches continues où une fonction de distribution des composés est soit présumée, soit déterminée par une approche aux moments (Harstad & Bellan, 2004; Laurent, 2008). Les carburants utilisés dans les transports sont des mélanges complexes de nombreux composés. Le kérosène utilisé dans l'aviation contient plus d'une centaine d'hydrocarbures et d'additifs différents dont les propriétés physiques sont très différentes. La composition variée du carburant a un effet important sur la composition de la vapeur dans les chambres de combustion, influence la structure de la flamme, sa stabilisation ou la formation de polluants. Les différents composés d'un carburant, et c'est le rôle de certains additifs, modifient également les temps caractéristiques d'allumage.

L'extension des modèles d'évaporation développés pour des gouttes isolées à des groupes de gouttes n'est pas une tâche facile. Les travaux de Imaoka & Sirignano (2005a,b) ont démontré que l'augmentation de la densité de liquide augmentait très nettement les temps d'évaporation. Cet effet accentué par des conditions de hautes pressions a également été observé par Harstad & Bellan (2001). En combustion, la prise en compte de l'interaction des vapeurs de gouttes voisines conduit à favoriser les modes de combustion de groupe au détriment des flammes isolées autour de gouttes (Imaoka & Sirignano, 2005b).

Ces effets influencent plus fortement les phénomènes instationnaires dont les temps caractéristiques sont très petits devant les temps caractéristiques de l'écoulement diphasique global. Ils ne sont actuellement pas pris en compte dans AVBP. La modélisation de l'effet d'encombrement des gouttes sur l'évaporation pourrait éventuellement être prise en compte via un facteur correctif du taux d'évaporation fonction de la densité de gouttes. En revanche, la prise en compte de la composition complexe des carburants n'est actuellement pas à l'ordre du jour. En effet, les schémas cinétiques développés pour la combustion dans les simulations aux grandes échelles (Franzelli, 2010) sont des schémas réduits qui conduisent au transport et à la résolution de quelques espèces majoritaires (N_2 , O_2 , CO_2 , H_2O , CO et le carburant). Le choix d'une modélisation simple pour le kérosène, carburant employé pour les expériences sur le banc MERCATO, est détaillée au §-6.3.

6.2 Évaluation du modèle retenu dans AVBP

Le modèle implanté dans AVBP, est donc un modèle hydrodynamique à conduction infinie dans la goutte et à diffusion sphérique dans le gaz. Dans cette section, une étude concernant le calcul des propriétés de transport du gaz dans la couche de gaz environnant la goutte est réalisée. Dans AVBP, les coefficients de transport sont recalculés à partir des nombres de Prandtl Pr et de Schmidt Sc constants et de la viscosité dynamique μ du mélange gazeux. Il convient d'étudier si ce choix qui est une bonne approximation dans l'écoulement, est aussi valable pour le mélange riche en carburant à proximité de la surface de la goutte.

6.2.1 Formulations pour l'évaluation des propriétés du mélange gazeux

Pour calculer les taux d'évaporation et de transfert de chaleur selon les Eqs. (3.44) et (3.59), il faut évaluer les propriétés du mélange gazeux $[\rho D_F]$, λ et $\overline{C_p}$ à l'état de référence. L'état de référence choisi dans AVBP correspond à la règle dite du *un tiers-deux tiers* préconisée par Hubbard *et al.* (1975), Eq. (3.31) pour la température et Eqs. (3.32) et (3.33) pour le mélange.

L'étude de Hubbard *et al.* (1975) s'intéresse à l'influence du calcul des propriétés gazeuses sur l'évaporation d'une gouttelette de n-octane dans une atmosphère infinie au repos. Dans cette étude les évolutions temporelles des diamètres de gouttes obtenues pour des calculs avec des propriétés variables⁸ et des calculs avec des propriétés constantes sont comparées. Les propriétés de transport de la phase gazeuse sont calculées à partir de relations issues de la théorie cinétique des gaz de Chapman-Enskog. Ainsi il convient de vérifier que les propriétés de transport calculées dans AVBP à l'état de référence en utilisant l'approche simplifiée avec les nombres de Prandtl Pr et de Schmidt Sc_F constants conduit à une bonne estimation des temps d'évaporation, comme cela a été établi par Hubbard *et al.* (1975).

Pour étudier spécifiquement le problème d'évaporation d'une goutte isolée, les routines d'évaporation sont extraites du code AVBP pour être utilisées dans un petit module d'évolution temporelle⁹. Les équations différentielles Eqs. (6.1)-(6.5) sont intégrées par une méthode itérative au premier ordre. Grâce à cet outils, on peut comparer 2 approches pour

⁸Les propriétés évoluent en fonction de la distance à la surface de la goutte. Le taux d'évaporation est obtenu en intégrant explicitement le flux d'espèce en fonction de la coordonnée radiale, le taux de transfert de chaleur en intégrant explicitement le flux d'enthalpie.

⁹Ce module externe a été écrit par M. Boileau. Il est disponible dans la banque d'outils d'AVBP sous le nom `evol_evap0d`. Il a été adapté pour les besoins de cette étude.

calculer les coefficients de transport.

$$\frac{d}{dt}\rho = \Gamma \quad (6.1)$$

$$\frac{d}{dt}\rho E = \Pi_g \quad (6.2)$$

$$\frac{d}{dt}\rho Y_k = \delta_{kF}\Gamma \quad (6.3)$$

$$\frac{d}{dt}\rho_l \check{\alpha}_l = -\Gamma \quad (6.4)$$

$$\frac{d}{dt}\rho_l \check{\alpha}_l \check{h}_{s,l} = -\Pi_g + \Gamma h_{s,corr} \left(0, T_l^{ref} \right) \quad (6.5)$$

→ **Formulation employée dans AVBP : propriétés de transport simplifiées (thermo_AVBP)**

L'évaluation des propriétés de transport pour l'évaporation utilisant les propriétés simplifiées présentées au Chapitre 3, §-3.2.4, suit le schéma Fig. 6.3. Dans la suite, les résultats obtenus avec cette procédure seront notés **thermo_AVBP**.

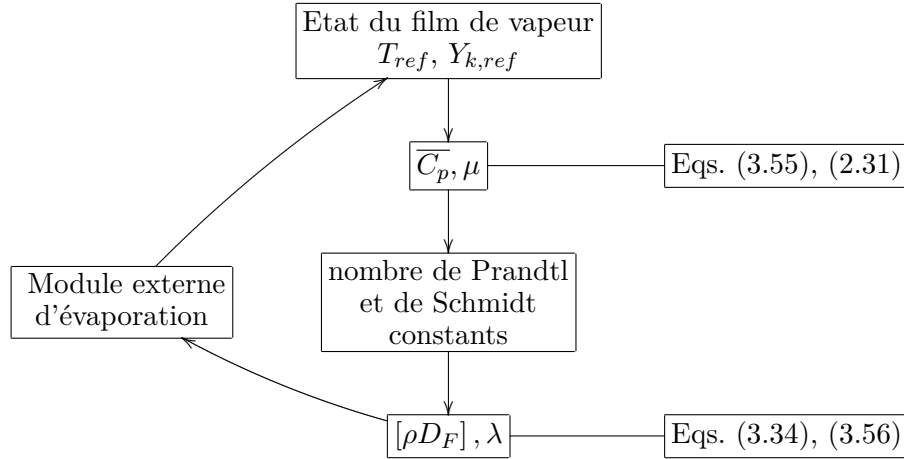


FIG. 6.3: thermo_AVBP : Calcul de l'évaporation en utilisant les propriétés simplifiées de transport à l'état de référence.

→ **Formulation de référence : propriétés de transport détaillées (thermo.MIX)**

Une formulation plus précise que celle d'AVBP est utilisée ici comme référence : il s'agit de la théorie cinétique complète (Hirschfelder *et al.*, 1964) implantée, par exemple, dans le logiciel libre CANTERA (Goodwin, 2009).

La librairie de routines Fortran de CANTERA est utilisée maintenant au cours du processus d'évaporation pour calculer les propriétés de transport à l'état de référence, à partir des relations issues de la cinétique de gaz. Le calcul des propriétés de transport moléculaire et des propriétés thermodynamiques dans CANTERA suit la théorie unifiée présente dans plusieurs codes de chimie détaillée qui est décrite par Kee *et al.* (1986). Elle s'appuie sur la théorie cinétique des gaz de Chapman-Enskog et l'expression des forces intermoléculaires par les potentiels de Lennard-Jones (Hirschfelder *et al.*, 1964; Bird *et al.*, 2002). Nous rappelons, dans un premier temps, les formules utilisées dans les routines CANTERA.

Pour chaque composé, la viscosité s'écrit :

$$\mu_k = \frac{5}{16} \frac{\overline{\pi m_k k_B T}}{\pi \sigma_k^2 \Omega_{\mu,k}} \quad (6.6)$$

avec σ_k le diamètre de collision pour l'espèce k , m_k la masse de la molécule, k_B la constante de Boltzmann, et $\Omega_{\mu,k}$ l'intégrale de collision pour la viscosité évaluée à

la température $T_k^* = \frac{k_B T}{\epsilon_k}$. avec ϵ_k le maximum d'énergie d'attraction entre deux molécules identiques.

La conductivité thermique d'une espèce se décompose en trois contributions (translation, rotation et vibration) :

$$\lambda_k = \frac{\mu_k}{W_k} (f_{\text{trans}} C_{v,\text{trans}} + f_{\text{rot}} C_{v,\text{rot}} + f_{\text{vib}} C_{v,\text{vib}}) \quad (6.7)$$

Les contributions f_{trans} , f_{rot} et f_{vib} dépendent de la géométrie des molécules de l'espèce considérée (Kee *et al.*, 1986).

Le coefficient de diffusion propre¹⁰ s'écrit :

$$D_{kk} = \frac{3}{16} \frac{\sqrt{2\pi k_B^3 T^3 / m_k}}{\pi P \sigma_k^2 \Omega_{\mathcal{D},kk}} \quad (6.8)$$

avec $\Omega_{\mathcal{D},kk}$ l'intégrale de collision pour la diffusion à la température T_k^* .

Le coefficient de diffusion binaire s'écrit :

$$D_{ij} = \frac{3}{16} \frac{\sqrt{2\pi k_B^3 T^3 / m_{ij}}}{\pi P \sigma_{ij}^2 \Omega_{\mathcal{D},ij}} \quad (6.9)$$

avec $m_{ij} = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j}$ la masse atomique réduite de la paire (i, j) , $\sigma_{ij} = \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2}$ le diamètre de collision réduit et $\Omega_{\mathcal{D},ij}$ l'intégrale de collision déterminée à $T_{ij}^* = \frac{k_B T}{\epsilon_{ij}}$ avec $\frac{\epsilon_{ij}}{k_B} = \sqrt{\frac{\epsilon_i}{k_B} \frac{\epsilon_j}{k_B}}$ l'énergie caractéristique réduite.

A partir des propriétés pour chaque corps pur, les propriétés pour le mélange sont obtenues par des formules de moyennes pondérées semi-empiriques. Ainsi la viscosité du mélange à l'état de référence se calcule selon la formule de Wilke (Bird *et al.*, 2002) :

$$\mu = \sum_i \frac{X_i \mu_i}{\sum_j X_j \Phi_{ij}} \quad (6.10)$$

$$\Phi_{ij} = \frac{1}{8} \left(1 + \frac{W_i}{W_j} \right)^{-1/2} \left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{1/2} \left(\frac{W_j}{W_i} \right)^{1/4} \right]^2 \quad (6.11)$$

La conductivité thermique du mélange est construite selon la formule de Mathur (Kee *et al.*, 1986) :

$$\lambda = \frac{1}{2} \left(\sum_k X_k \lambda_k + \frac{1}{\sum_k X_k / \lambda_k} \right) \quad (6.12)$$

¹⁰Diffusion de l'espèce k dans la gaz pur de l'espèce k .

Le coefficient de diffusion de l'espèce k dans le mélange selon l'expression (Kee *et al.*, 1986) :

$$D_k = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k} X_j / D_{jk}} \quad (6.13)$$

L'évaluation des propriétés de transport pour l'évaporation utilisant les propriétés détaillées présentées ci-dessus suit le schéma Fig. 6.4. Dans la suite, les résultats obtenus avec cette procédure seront notés **thermo_MIX**.

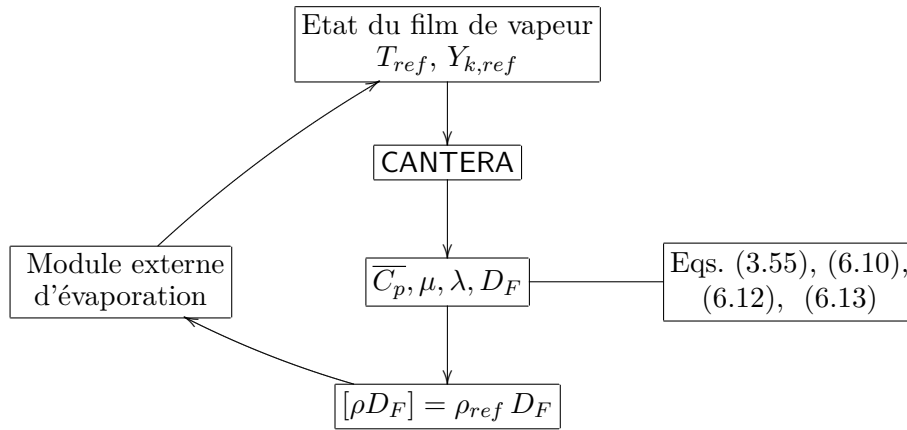


FIG. 6.4: **thermo_MIX** : Calcul de l'évaporation en utilisant les propriétés détaillées de transport à l'état de référence.

6.2.2 Évaporation de gouttes isolées de n-heptane

Il s'agit de comparer les résultats obtenus en employant les procédures **thermo_AVBP** et **thermo_MIX** pour l'évaluation des propriétés de transport à l'état de référence. Pour cela, nous avons choisi de reproduire un cas d'évaporation de goutte isolée bien documenté. L'évaporation de gouttes de n-heptane dans une atmosphère au repos a fait l'objet de plusieurs études et notamment celle de Nomura *et al.* (1996). Cette dernière a été utilisée par Sazhin *et al.* (2006) pour évaluer différentes modélisations pour les phases gazeuse et liquide. Le travail présenté dans ce paragraphe a été initié par C. Habchi dans le cadre du projet SIGLE (Habchi, 2009a) qui s'est intéressé à de nouvelles mesures expérimentales d'évaporation de gouttes de n-heptane réalisées par Chauveau *et al.* (2008) pour les mêmes conditions opératoires décrites ci-dessous.

Dans les expériences considérées (Nomura *et al.*, 1996; Chauveau *et al.*, 2008), le diazote N_2 est utilisé comme gaz ambiant au repos dans lequel une goutte de n-heptane est mise

en suspension sur une fibre en quartz pour limiter les effets de conduction thermique. Pour différentes températures et pressions du gaz ambiant, le diamètre de la goutte est mesuré jusqu'à la disparition de la goutte. Les vitesses de régression de la surface de la goutte et les temps d'évaporation des gouttes serviront pour la comparaison, des résultats du modèle d'évaporation d'AVBP et des 2 procédures d'évaluation des coefficients de transport à l'état de référence.

Le diazote et le n-heptane sont des espèces dont les propriétés sont très bien caractérisées. Les propriétés du diazote et du n-heptane sont issues des tables NIST-JANAF (Chase, 1998). Les paramètres thermodynamiques du n-heptane sous forme liquide sont constants¹¹ et sont donnés Tab. 6.1. Pour le calcul des propriétés détaillées de transport, les paramètres utilisés sont reproduits Tab. 6.2. Pour le calcul des propriétés simplifiées de transport les paramètres sont données Tab. 6.3 qui correspondent à l'état du gaz à l'infini de la surface de la goutte.

Température d'ébullition @ 1 atm.	$T_b = 371.52 \text{ K}$
Masse volumique @ 371.52 K	$\rho_l = 688 \text{ kg/m}^3$
Capacité calorifique @ 371.52 K	$C_{p,l} = 2.558 \times 10^3 \text{ J/kg/K}$
Enthalpie de vaporisation @ 371.52 K	$L_{vap} = 316.35 \times 10^3 \text{ J/kg}$

TAB. 6.1: Propriétés du n- C_7H_{16} sous forme liquide

Paramètres	N_2	n- C_7H_{16}
σ_k (Å)	3.62	6.25
$\frac{\epsilon_k}{k_B}$ (K)	97.5	459.6
géométrie	linéaire	non-linéaire

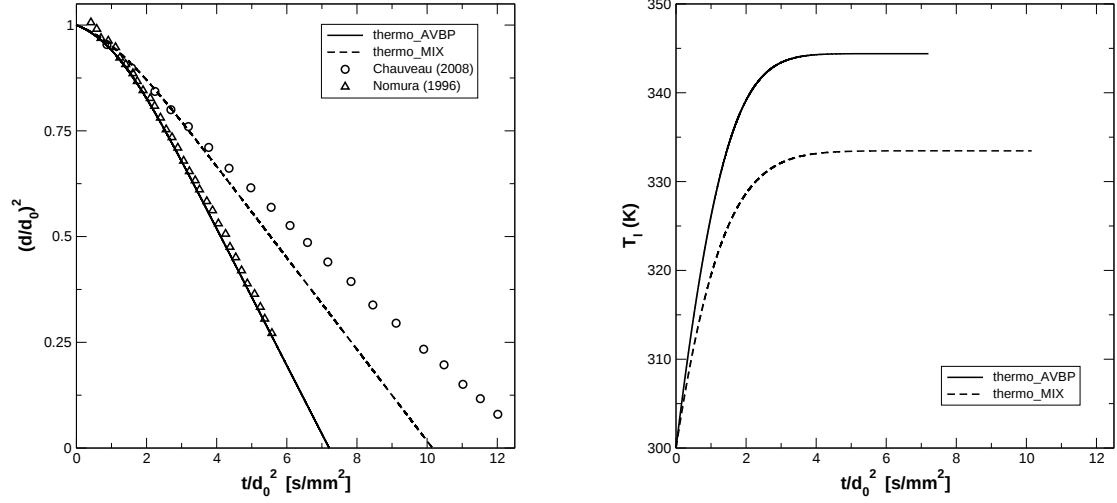
TAB. 6.2: Paramètres pour la construction des potentiels de Lennard-Jones.

Nombre de Prandtl du mélange	$Pr = 0.71$
Nombre de Schmidt du n-C_7H_{16}	$Sc_F = 2.10$
Nombre de Schmidt du N_2	$Sc_{N_2} = 0.88$
Viscosité dynamique du mélange	$\mu(T) = \mu_0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^\beta$ avec $\mu_0 = 2.52 \times 10^{-5} \text{ kg/m/s}$ $T_0 = 473 \text{ K}$ et $\beta = 0.667$

TAB. 6.3: Propriétés du gaz N_2 pur.

Dans cette section, les résultats présentés correspondent à l'évaporation d'une goutte de n-heptane dans une atmosphère de N_2 pur à 1 bar et 473 K. La goutte est initialement à 300 K et son diamètre vaut 500 μm . Les résultats sont superposés pour les 2 procédures présentées : thermo_AVBP et thermo_MIX. L'évolution du carré du diamètre adimensionné est comparée aux mesures expérimentales de (Nomura *et al.*, 1996; Chauveau *et al.*, 2008).

¹¹ Les propriétés thermodynamiques de la phase liquide pourraient être évaluées de manière plus précises en prenant en compte la variation du $C_{p,l}$ en fonction de la température (Habchi, 2009b).



(a) Evolution temporelle de la surface de goutte adimensionnée.

(b) Evolution temporelle de la température du liquide.

FIG. 6.5: *Evaporation d'une goutte de n-heptane dans du diazote à pression 1 bar et à 473 K.*

En observant les évolutions temporelles de la surface de goutte Fig. 6.5(a), la première remarque qui doit être faite porte sur l'écart important entre les deux séries de mesures expérimentales : dans les expériences de Chauveau *et al.* (2008), le temps d'évaporation est multiplié par 2 par rapport aux expériences de Nomura *et al.* (1996) qui sont pourtant faites dans des conditions similaires¹² ! La pente de la *loi du d^2* , notée C_v , définie à l'Eq. (6.14), passe de 0.16 mm²/s pour les mesures de Nomura *et al.* (1996) à 0.07 mm²/s pour les mesures de Chauveau *et al.* (2008).

$$d^2(t) = d_0^2 - C_v t \quad (6.14)$$

L'évolution de la surface pour la procédure **thermo_AVBP**, employant la thermodynamique simplifiée d'AVBP, suit la tendance des résultats de Nomura *et al.* (1996). La procédure utilisant les propriétés détaillées **thermo_MIX** a une tendance intermédiaire aux deux séries de mesures. La température d'équilibre final T_{wb} obtenue sur la Fig. 6.5(b) pour chacune des 2 procédures n'est pas la même. On observe un écart de plus de 10 K indiquant un effet fort du choix des coefficients thermodynamiques dans ce problème d'évaporation de goutte isolée.

Les temps d'évaporation et la température du liquide sont les conséquences des flux massiques et thermiques vers le gaz. L'évolution du taux d'évaporation est représentée Fig. 6.6(a). Le taux d'évaporation augmente plus rapidement et jusqu'à une valeur plus grande pour la procédure **thermo_AVBP** que pour la procédure utilisant les propriétés de transport détaillées. Initialement le taux d'évaporation est très proche pour les 2 procé-

¹²Les auteurs justifient l'écart entre les données expérimentales par l'utilisation d'un nouveau système de support pour la suspension de la goutte dans l'enceinte chauffante. Ce système utilisant des fibres de quartz plus fines serait moins intrusif que celui employé par Nomura *et al.* (1996).

dures. La fraction massique de carburant évaporé à la surface étant nulle à l'instant initial, le nombre de Spalding de masse B_M est nul, ainsi le taux d'évaporation devient :

$$\Gamma_{g \ t=0} = n_l \pi d Sh [\rho D_F] \quad (6.15)$$

Ainsi entre les 2 procédures seule la valeur initiale de D_F diffère dans l'expression Eq. (6.15). L'évolution temporelle du coefficient de diffusion moléculaire D_F à l'état de référence est donnée Fig. 6.6(b). La différence est initialement faible mais suffit à faire évoluer différemment les deux séquences d'évaporation. Le coefficient binaire croît avec la température T_{ref} dans le film gazeux autour de la goutte augmente. En revanche le coefficient de diffusion dans le mélange diminue au cours du temps du fait de l'augmentation de la proportion de n-heptane près de la surface de la goutte. En effet, pour le mélange binaire N_2 et n- C_7H_{16} , l'Eq. (6.13) se réécrit pour le coefficient de diffusion de n- C_7H_{16} dans le mélange :

$$D_F = \frac{W_{N_2} D_{N_2, n-C_7H_{16}}}{\bar{W}} = (1 - Y_F) D_{N_2, n-C_7H_{16}} \quad (6.16)$$

Ainsi pour la procédure **thermo_MIX**, le coefficient de diffusion D_F diminue au cours du temps du fait de l'augmentation de la fraction de carburant dans la couche de gaz environnant la goutte.

Pour la procédure **thermo_AVBP** le coefficient de diffusion D_F se réécrit en fonction de la viscosité dynamique :

$$D_F = \frac{\mu_0 R T_{ref}^{\beta+1}}{T_0^\beta P \bar{W} S_{CF}} \quad (6.17)$$

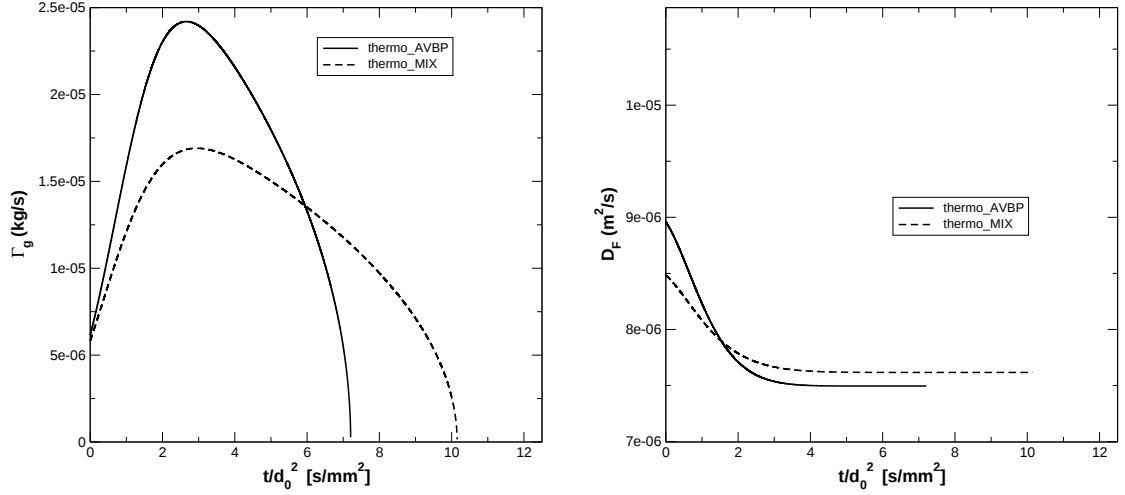
La diminution du coefficient de diffusion pour la procédure **thermo_AVBP** signifie que l'augmentation de $T_{ref}^{\beta+1}$ est plus faible que l'augmentation de $\bar{W}$. Le coefficient de diffusion déterminé à partir des propriétés de transport simplifiées donne une bonne estimation du coefficient de diffusion du n-heptane dans le mélange. L'écart du coefficient D_F évalué par les procédures **thermo_AVBP** et **thermo_MIX** ne justifie pas à lui seul l'évolution différente du taux d'évaporation des évaluations simplifiée et détaillée des propriétés de transport et il est utile d'examiner maintenant l'effet de la conductivité thermique λ .

Les évolutions temporelles du flux thermique dans le sens liquide vers gaz¹³ et de la conductivité thermique au point de référence de la règle du *un tiers-deux tiers* sont données pour les 2 procédures sur la Fig. 6.7.

La conductivité thermique issue de **CANTERA** varie faiblement au cours du temps, comme le montrent les courbes correspondant à la procédure **thermo_MIX** sur la Fig. 6.7(b). Par contre, la conductivité thermique évaluée par Eq. (3.56) augmente avec la température. La valeur finale de la conductivité dans la procédure **thermo_AVBP** est 50% plus importante que dans la procédure utilisant le transport détaillé. Le fort coefficient de conductivité thermique conduit à un fort flux thermique du gaz vers la goutte Fig. 6.7(a), ce qui conduit à une température plus importante pour la procédure **thermo_AVBP** (Fig. 6.5(b)).

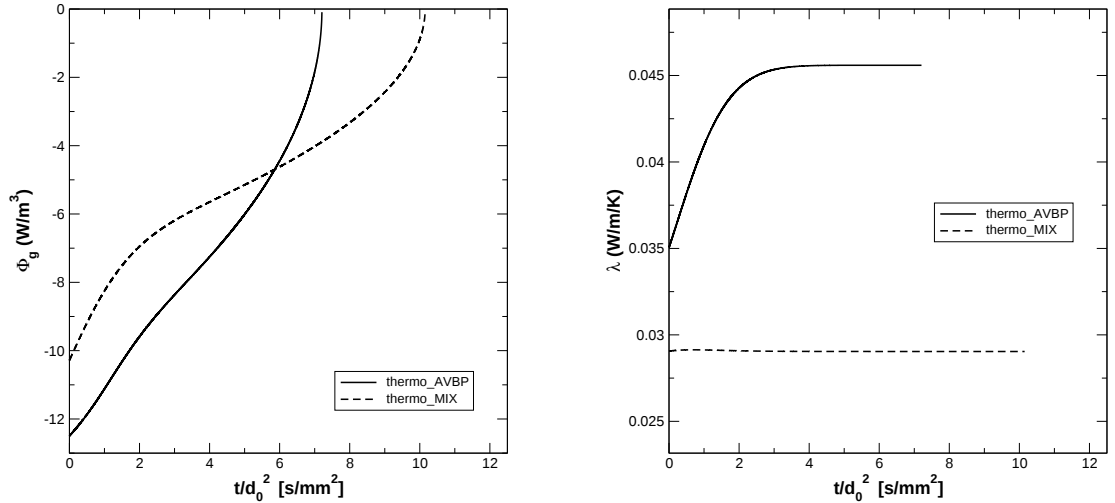
Dans la procédure **thermo_AVBP** le coefficient de conductivité thermique dans le gaz est évalué, selon l'Eq. (6.18) à partir du nombre de Prandtl constant, de la viscosité

¹³Les valeurs négatives assurent que le gaz fournit de la chaleur au liquide.



(a) Evolution temporelle du taux d'évaporation en kg/s. (b) Evolution temporelle du coefficient de diffusion moléculaire D_F en m²/s au point de référence $(T_{ref}, Y_{k,ref})$.

FIG. 6.6: Evaporation d'une goutte de *n*-heptane dans du diazote à pression 1 bar et à 473 K.



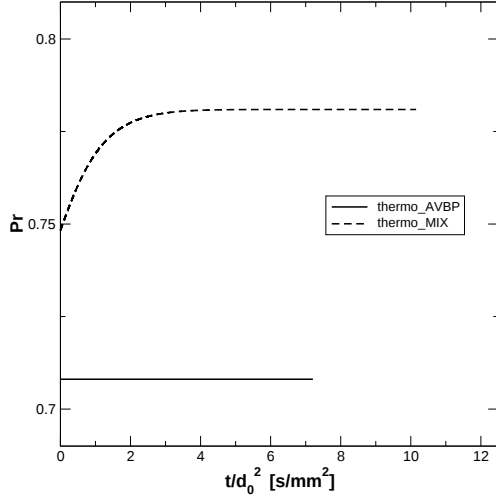
(a) Evolution temporelle du flux de chaleur en W/m³. (b) Evolution temporelle de la conductivité thermique λ en W/m/K au point de référence $(T_{ref}, Y_{k,ref})$.

FIG. 6.7: Evaporation d'une goutte de *n*-heptane dans du diazote à pression 1 bar et à 473 K.

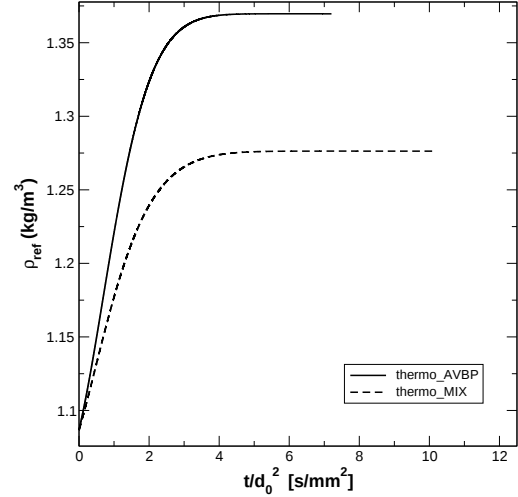
cinématique $\nu(T_{ref})$, de la masse volumique $\rho(T_{ref}, Y_{k,ref})$ et de la capacité calorifique à pression constante $C_p(T_{ref}, Y_{k,ref})$ au point de référence. L'évolution temporelle de ces 4 grandeurs est donnée Fig 6.8 pour les procédures **thermo_AVBP** et **thermo_MIX**. ρ , ν et $\overline{C_p}$ étant plus élevés pour la formulation **thermo_AVBP** que pour **thermo_MIX** et Pr plus faible, on comprend aisément que la conductivité thermique du gaz au point de référence

soit sur-estimée dans la formulation thermo_AVBP.

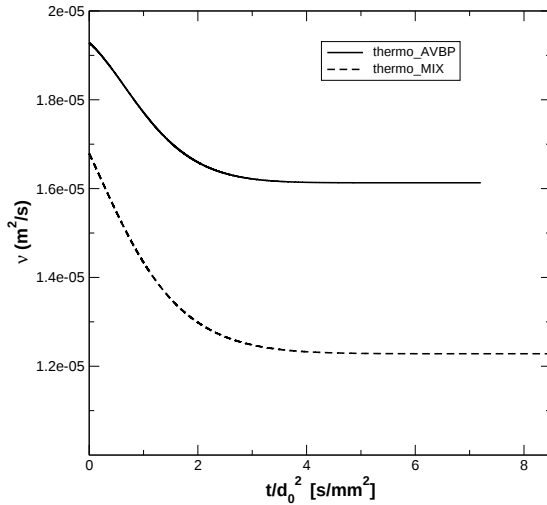
$$\lambda(T_{ref}, Y_{k,ref}) = \frac{\overline{C_p}(T_{ref}, Y_{k,ref}) \rho(T_{ref}, Y_{k,ref}) \nu(T_{ref})}{Pr} \quad (6.18)$$



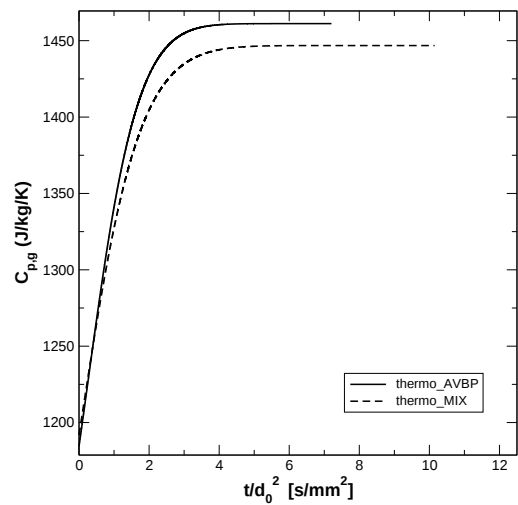
(a) Evolution temporelle nombre de Prandtl au point de référence.



(b) Evolution temporelle de la masse volumique du gaz au point de référence.



(c) Evolution temporelle de la viscosité cinématique du gaz au point de référence.



(d) Evolution temporelle de la capacité calorifique $\overline{C_p}$ du gaz au point de référence.

FIG. 6.8: *Evaporation d'une goutte de n-heptane dans du diazote à pression 1 bar et à 473 K.*

Afin de déterminer la procédure d'évaluation des propriétés de transport la plus exacte, il faut déterminer laquelle des 2 tendances sur la Fig. 6.5(b) est la plus réaliste. Les températures *wet-bulb* obtenues avec les 2 procédures à différentes températures gazeuses et à pression atmosphérique sont comparées sur la Fig. 6.9 aux données expérimentales de (Yuen & Chen, 1976) pour le n-heptane. La température prédite avec la procédure thermo_AVBP est au dessus des températures mesurées par Yuen & Chen (1976). La procédure

thermo_MIX utilisant des propriétés de transport détaillées donne une estimation plus réaliste de la température humide.

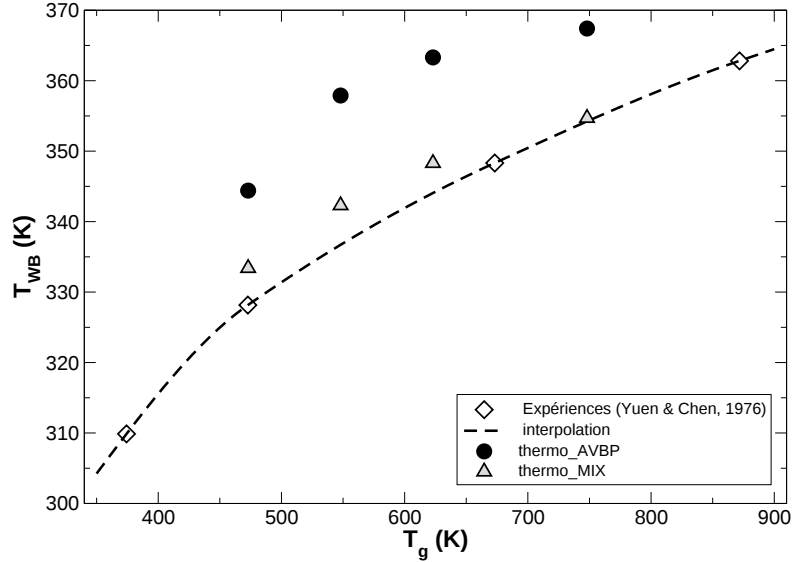


FIG. 6.9: Mesures expérimentales et estimations de la température wet-bulb pour le n-heptane à pression 1 bar, en fonction de la température de l'atmosphère au repos.

Pour résumer cette étude on peut évaluer les qualités des deux procédures testées, selon différents critères données Tab. 6.4. On considère la procédure thermo_MIX comme référence pour l'estimation des propriétés de transport.

	thermo_AVBP	thermo_MIX
vitesse de régression de la surface	+	+
température <i>wet-bulb</i>	—	+
coefficient de diffusion	+	réf.
conductivité thermique	—	réf.
temps de calcul	très rapide	long

TAB. 6.4: Résumé des comparaisons entre les procédures d'évaluation des propriétés de transport. La qualité des résultats sur les différents points observés est notée : — médiocre, + bon.

Ainsi la procédure thermo_AVBP qui emploie les propriétés de transport simplifiées sur-estime le coefficient de conductivité thermique. Le flux thermique plus important conduit cette procédure à prévoir un échauffement et une évaporation plus rapide des gouttes. La vitesse de régression de la surface de la goutte coïncide avec celle mesurée par Nomura *et al.* (1996). On peut considérer que tant que les résultats de Chauveau *et al.* (2008) ne seront pas confirmés par d'autres études expérimentales, les données de Nomura *et al.* (1996) donnent une bonne estimation de la vitesse d'évaporation d'une goutte isolée. La vitesse d'évaporation est la donnée essentielle qu'il faut capturer pour un code dédié à la combustion. En effet cette vitesse pilote la production de carburant gazeux. Ainsi à ce stade des connaissances, le modèle d'évaporation d'AVBP employant des propriétés de

transport simplifiées est satisfaisant en terme de résultats et de coût de calcul pour les travaux présentés dans cette thèse. Les futurs développements d'AVBP, il est envisagé de prendre en compte en plus de la température, l'influence de la composition locale sur valeur de la viscosité dynamique et ainsi d'améliorer l'évaluation des coefficients de transport.

6.3 Modélisation du kérosène liquide

Le kérosène est un carburant liquide utilisé dans l'avion civile et militaire. Il s'agit en fait de ce que l'on appelle un carburant multi-composants. En effet, "kérosène" est une dénomination qui englobe plusieurs mélanges d'un grand nombre d'hydrocarbures et d'additifs. Les mélanges ne sont pas précisément définis, leurs propriétés physiques (plage d'ébullition, volatilité, dégagement de chaleur, point de gel, etc...) remplissent une liste de spécifications internationales (Edwards & Maurice, 2001; Coordinating Research Council, 2004). Les carburants utilisés dans l'aviation civile sont le Jet-A et Jet-A1. Le JP-8 est le carburant utilisé par l'US Air Force, il est très proche en composition du Jet-A1, mais contient quelques additifs supplémentaires. Les spécifications de ces trois kérosènes sont très larges et une grande variété de mélange peut remplir ces spécifications. A la sortie d'une raffinerie, le mélange fourni peut varier au cours d'une journée en fonction de la provenance du pétrole brut. Les principaux composants hydrocarbures sont : des alcanes pour 50 à 60% du volume, des composés aromatiques pour 10 à 20% du volume et des naphthalènes ou cyclo-alcanes pour 20 à 30 % du volume.

En raison de la complexité des mélanges et de leur variabilité, il est nécessaire de définir des *modèles* de kérosène, ou *surrogates* en anglais, dont la composition et les propriétés sont bien définies et qui ont des propriétés identiques ou similaires aux kérosènes habituels. Le plus simple *surrogate* pour le kérosène est le n-decane. En effet, en terme de densité, de viscosité ou de capacité thermique, il rentre dans les spécifications du Jet-A1. La volatilité du n-decane n'est pas aussi importante que celle du kérosène. De plus sa réactivité chimique n'est pas suffisante pour décrire correctement le mécanisme d'oxydation du kérosène. Ainsi les schémas cinétiques complexes utilisés pour modéliser l'oxydation du kérosène sont basés sur des *surrogates* chimiques composés pour la plupart de 3 composants : un n-alcane, un aromatique et un cyclo-alcane (Dagaut & Cathonnet, 2006; Dagaut *et al.*, 2006). Le *surrogate* choisi pour modéliser le kérosène dans AVBP, a été sélectionné pour être cohérent avec les modèles déjà utilisés chez SNECMA et TURBOMECA. Ainsi le modèle choisi correspond au mélange utilisé par Luche (2003) dans sa thèse pour établir un modèle détaillé de l'oxydation du kérosène. Dans AVBP, une *meta*-espèce chimique KERO_LUCHE est créée comme le composé moyen du *surrogate* de Luche (2003). Les propriétés de l'espèce sont calculées comme une moyenne pondérée par les fractions massiques des trois corps purs constituants donnés à la table Tab. 6.5.

A partir du schéma détaillé de Luche (2003), un schéma réduit a été établi pour modéliser l'oxydation du kérosène à pression atmosphérique dans AVBP (Sanjosé *et al.*, 2008). Ce mécanisme cinétique est étendu sur une large gamme de points de fonctionnement par Franzelli *et al.* (2009).

Nom du Composé	Formule	Fraction Massique	Masse Molaire [g/mol]
Decane	$NC_{10}H_{22}$	0.767	142.284
Propylbenzene	PHC_3H_7	0.132	120.194
Propylcyclohexane	CYC_9H_{18}	0.101	126.241
KERO_LUCHE	$C_{9.73957}H_{20.0542}$	1	137.195

TAB. 6.5: Définition du surrogate du kérosène par Luche (2003).

6.3.1 Propriétés thermodynamiques du KERO_LUCHE

A partir des trois corps purs, on peut calculer les coefficients des polynômes CHEMKIN-II pour l'espèce KERO_LUCHE donnés Tab. 6.6. La table d'enthalpies et d'entropies d'AVBP, cf. section 2.2, est construite à partir des polynômes CHEMKIN-II pour chaque plage de température, selon les expressions suivantes :

$$\frac{h_{s,k}^m(T)}{RT} = a_{1,k} + \frac{a_{2,k}}{2} T + \frac{a_{3,k}}{3} T^2 + \frac{a_{4,k}}{4} T^3 + \frac{a_{5,k}}{5} T^4 + \frac{a_{6,k}}{T} \quad (6.19)$$

$$\frac{s_k^m(T)}{R} = a_{1,k} \ln T + a_{2,k} T + \frac{a_{3,k}}{2} T^2 + \frac{a_{4,k}}{3} T^3 + \frac{a_{5,k}}{4} T^4 + a_{7,k} \quad (6.20)$$

300-1000 K	-4.15×10^0	1.28×10^{-1}	-1.08×10^{-4}	6.53×10^{-8}
	-2.08×10^{-11}	-2.83×10^4	5.09×10^1	
1000-5000 K	2.20×10^1	5.61×10^{-2}	-2.09×10^{-5}	3.57×10^{-9}
	-2.30×10^{-13}	-3.61×10^4	-8.60×10^1	

 TAB. 6.6: Coefficients $a_{i,F}$ du polynôme CHEMKIN-II de l'espèce KERO_LUCHE indiquée F .

6.3.2 Propriétés diffusives

Les propriétés de transport du KERO_LUCHE dans l'air sont approchées par celles du n-decane dans l'air.

Nombre de Prandtl du mélange	$Pr = 0.70995$
Nombre de Schmidt du kérosène	$Sc_F = 2.2763$
Viscosité dynamique du mélange	$\mu(T) = \mu_0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^\beta$ avec $\mu_0 = 2.554 \times 10^{-5}$ kg/m/s $T_0 = 463$ K et $\beta = 0.71016$

TAB. 6.7: Propriétés du mélange gazeux air-kérosène à l'infini de la surface de la goutte.

6.3.3 Propriétés du liquide

Harstad & Bellan (2004) modélisent la composition du kérosène Jet-A par une fonction de distribution double-Gamma de la distribution de la masse molaire des composants du Jet-A. Les propriétés du KERO_LUCHE sous forme liquide sont évaluées à partir des corrélations établies par Harstad & Bellan (2004) pour le kérosène Jet-A, en fixant le paramètre de la fonction de distribution $m = 137.2$ g/mol. Les propriétés obtenues ainsi, données Tab. 6.8, sont cohérentes avec celles que l'on peut calculer à partir des 3 constituants du KERO_LUCHE.

Température d'ébullition @ 1 atm.	$T_b = 445.1$ K
Masse volumique @ 300 K	$\rho_l = 781$ kg/m ³
Capacité calorifique @ 300 K	$C_{p,l} = 2.003 \times 10^3$ J/kg/K
Enthalpie de vaporisation @ 300 K	$L_{vap} = 289.01 \times 10^3$ J/kg

TAB. 6.8: *Propriétés de l'espèce KERO_LUCHE sous forme liquide*

6.4 Évaluation de la modélisation du kérosène en évaporation

6.4.1 Évaluation de la vitesse de régression de la surface des gouttes de kérosène

Les mesures expérimentales de temps d'évaporation du kérosène sont rares dans la littérature. Dans cette étude, l'évaporation d'une goutte de kérosène dans une atmosphère au repos est comparée aux mesures expérimentales de Ghassemi *et al.* (2006). Dans les expériences reproduites, une goutte de kérosène d'environ 1 mm de diamètre est introduite dans une enceinte de N_2 pur à différentes températures et pressions. Les courbes d'évolution de diamètre ne sont pas données, seules les pentes C_v (cf. Eq. (6.14)) des évolutions de la surface de la goutte lorsque la température dans la goutte devient constante sont accessibles (*loi du d^2*).

La comparaison des vitesses de régression de la surface de la goutte obtenues par Ghassemi *et al.* (2006) à 0.1 MPa avec les résultats obtenus avec AVBP, le modèle thermo_AVBP et les propriétés énoncées précédemment pour le KERO_LUCHE est donnée Fig. 6.10.

Pour des températures gazeuses en dessous de 700°C, les pentes obtenues avec AVBP sont du même ordre de grandeur que celles obtenues par Ghassemi *et al.* (2006). Cependant si les pentes augmentent bien avec la température, la tendance est trop faible par rapport aux expériences et un écart significatif apparaît au-delà de 800 K. À faible température, la modélisation du kérosène par la *méta*-espèce KERO_LUCHE donne une estimation correcte de la vitesse d'évaporation.

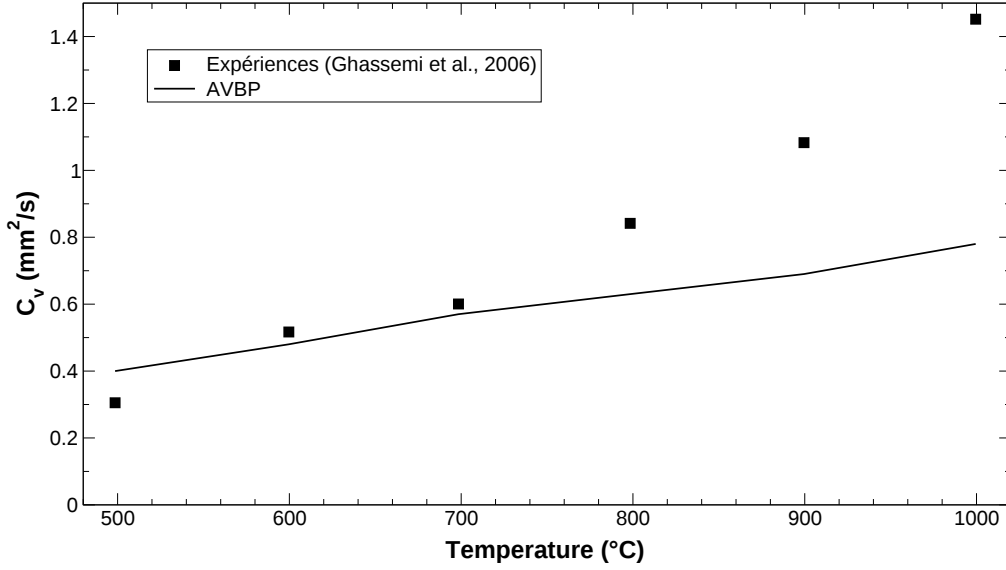


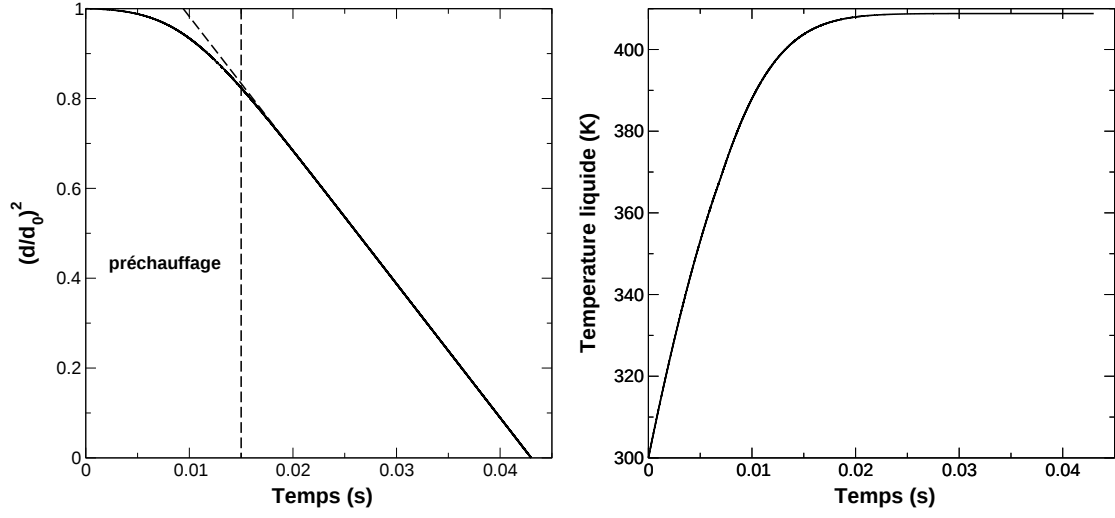
FIG. 6.10: Comparaison des pentes de la loi du d2 Eq. (6.14) pour le kérosène.

6.4.2 Évaluation des temps caractéristiques du processus d'évaporation pour le kérosène

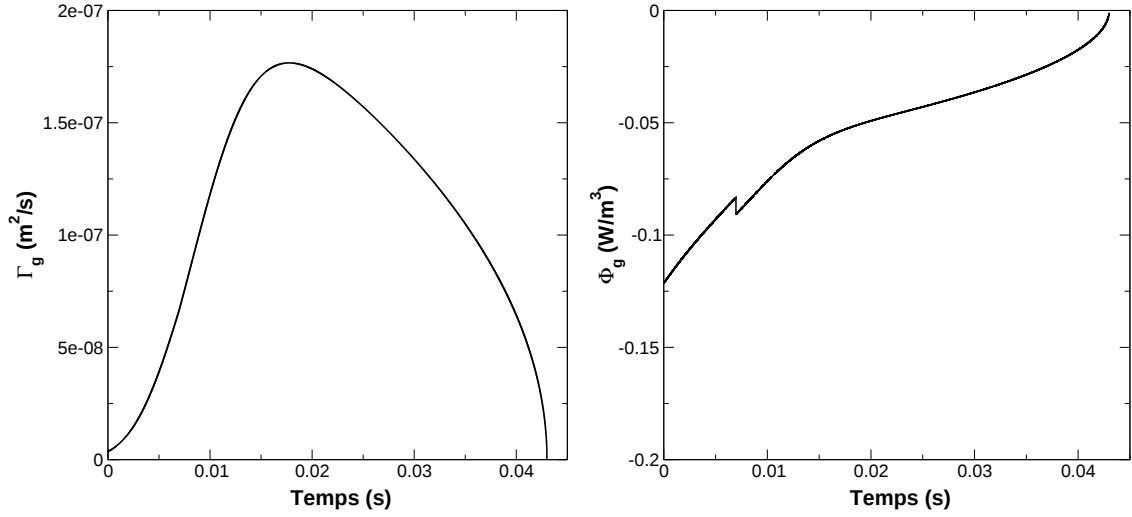
Dans la configuration MERCATO qui fera l'objet de la partie de ce manuscrit, des gouttes de kérosène liquide à 300 K sont injectées dans de l'air à pression atmosphérique et à une température de 463 K. Il est intéressant d'estimer le temps de vie de ces gouttes de diamètre 55 μm dans la chambre afin de le situer par rapport aux autres temps caractéristiques de la physique dans la configuration étudiée, cf. Chapitre 9, §-9.1.4. L'évolution de la surface adimensionnée et de la température de la goutte est donnée Fig. 6.11(a). L'évolution du taux d'évaporation et du flux de chaleur échangé par le gaz est donnée Fig. 6.11(b).

On distingue une première zone dite de *préchauffage*. La température du liquide et le taux d'évaporation augmentent fortement. Ensuite, l'évolution de la surface de la goutte suit la *loi du d2*, la température de la goutte n'évolue quasiment plus et le taux d'évaporation diminue. Le temps de préchauffage correspond au temps nécessaire à la goutte pour qu'elle atteigne l'évolution linéaire de sa surface. On repère ce temps comme le maximum sur la courbe d'évolution du taux d'évaporation, ou encore comme le point d'inflexion sur la courbe d'évolution du flux thermique reçu par le gaz. On note la discontinuité sur la courbe d'évolution du flux thermique Fig. 6.11(b), à droite. Elle correspond à l'instant où la température de référence T_{ref} définie par la règle des *un tiers-deux tiers* à l'Eq. (3.31), dépasse un palier de centaine, ici 400 K. En effet, dans l'expression du flux thermique intervient la capacité calorifique $\overline{C_p}$ du mélange gazeux dans la couche de gaz entourant la goutte, qui est construite selon l'Eq. (3.55) à partir des $C_{p,k}$ des espèces, constants par morceaux sur une plage de 100 K.

Pour la suite, nous définissons les temps de préchauffage τ_{ch} et d'évaporation τ_{evap} pour



(a) Evolution temporelle du diamètre adimensionné et de la température de la goutte.



(b) Evolution temporelle du flux de masse et de chaleur vers le gaz.

 FIG. 6.11: *Evaporation d'une goutte de kérosène de $55 \mu\text{m}$ dans de l'air au repos à 463 K et à pression atmosphérique.*

une goutte de $55 \mu\text{m}$:

$$\tau_{\text{ch}} = 15 \text{ ms} \quad (6.21)$$

$$\tau_{\text{evap}} = 42 \text{ ms} \quad (6.22)$$

Chapitre 7

Injection liquide pour l'approche Euler-Euler

Sommaire

7.1	Introduction	136
7.2	Principles of the FIM-UR methodology	138
7.2.1	The internal geometry parameters of the <i>model atomizer</i>	138
7.2.2	Parameters definition	139
7.2.3	FIM-UR principles	140
7.3	Building the injection profiles in the discharge orifice plane $x = x_0$	141
7.3.1	Evaluation of parameters for the <i>model atomizer</i>	141
7.3.2	Evaluation of injection values in the <i>real</i> injection plane $x = x_0$	142
7.4	Spray evolution from $x = x_0$ to $x = x_i$	143
7.4.1	Liquid velocity profiles and liquid volume fraction	143
7.4.2	Radial and azimuthal components of the droplet velocity at $x = x_i$	144
7.4.3	Liquid mass flow rate at $x = x_i$	146
7.4.4	Axial liquid momentum flux at $x = x_i$	146
7.4.5	Determination of the axial velocity component and the liquid volume fraction profiles	147
7.4.6	Gas axial velocity at $x = x_i$	147
7.5	Model for air entrainment by a hollow-cone spray	148
7.5.1	Integral model for gas entrainment by full-cone sprays	148
7.5.2	Definition of self-similarity profiles for the integral model for gas entrainment into hollow-cone sprays	149
7.5.3	Evaluation of the air entrainment coefficient	151
7.6	Utilisation de FIM-UR avec l'approche Euler-Euler en configuration réelle	152
7.6.1	Résumé de la méthodologie FIM-UR pour l'approche Euler-Euler	152
7.6.2	Décalage de l'injection dans une géométrie complexe	155
7.6.3	Etude de sensibilité du modèle à ses paramètres d'entrée	157

La modélisation de l'injection de carburant liquide est un point clé des simulations numériques diphasiques en géométrie complexe. Il s'agit de représenter la distribution de vitesse et de diamètre des gouttelettes du spray produit par un atomiseur réel. Dans ce travail, un modèle mono-dimensionnel est développé pour construire les profils d'injection nécessaires pour le code AVBP dans sa version Eulérienne ou Lagrangienne, à partir d'un nombre réduit de paramètres décrivant le fonctionnement de l'atomiseur. Ce type de modélisation est très largement utilisée dans les calculs d'injection de carburant dans les calculs de moteurs à piston d'automobile (Habchi *et al.*, 1997; Zolver *et al.*, 2002). Ici l'approche est adaptée pour les atomiseurs pressurisés-swirlés, et pourra être étendue à d'autres types d'atomiseurs. Un article décrivant la méthodologie du modèle d'injection ainsi que les résultats obtenus avec AVBP sur la configuration MERCATO est en cours d'écriture, en collaboration avec J. M. Senoner (Senoner *et al.*, 2009a). Les sections décrivant la méthodologie sont insérées dans ce chapitre. Quelques compléments sur l'influence des paramètres d'entrée du modèle et sur l'utilisation de ce modèle dans une simulation Euler-Euler sont ajoutés à la suite de la description du modèle au §-7.6.

7.1 Introduction

Large-Eddy simulation (LES) has demonstrated its potential for single-phase reacting flows in aeroengine combustors (Mahesh *et al.*, 2004; Selle *et al.*, 2004) and is being extended to two-phase reacting flows where the prediction of the combustion mechanisms depends on the quality of the fuel air mixing into the combustion chamber. Two-phase flow simulations are able to reproduce the droplet dispersion (Boivin *et al.*, 2000; Apte *et al.*, 2003; Riber *et al.*, 2009) and evaporation (Boileau *et al.*, 2008b; Patel & Menon, 2008; Apte *et al.*, 2009) mechanisms which influence the fuel air mixing. But the two-phase flow LES are limited to dispersed sprays and do not take into account primary atomization. As a result, these two-phase simulations rely on a detailed characterization of the fuel spray entering the combustion chamber.

The fuel spray pattern is produced by the atomization of the liquid fuel into small droplets. A liquid round jet would require a high pressure drop and a long distance to break up into droplets. The role of an atomizer is to increase the exchange interface between air and liquid fuel. Pressure-swirl atomizers are very effective as they produce a thin liquid sheet which is quickly destabilized into ligaments which break-up further into small drops. The resulting distribution patterns are delimited within a specific spray angle with the shape of hollow or solid cone. They interact with the swirled air injection of the combustion chamber, and fuel air mixing is enhanced.

As they are widely used for aeroengine applications pressure-swirl atomizers have been extensively studied and described in the literature (Lefebvre, 1989; Taylor, 1948; Bayvel & Orzechowski, 1993; Giffen & Muraszew, 1953). In a pressure-swirl atomizer the liquid fuel is pressurized and tangentially injected at high velocity into a swirl chamber. The contraction of the section leads to a high rotation velocity, an air core is created at the

center of the vortex inside the orifice channel, and the liquid is confined against the walls of the orifice. The pressure pushes the liquid through the orifice which immediately becomes a cone sheet, which breaks up into small droplets. At high pressure the atomization process is almost instantaneous. There are several types of internal geometry which rely on the same flow bases. The pressure-swirl of the *simplex* type has the simplest internal geometry, and the influence of several design parameters on the spray has been studied (Jones & Whitelaw, 1982; Rizk & Lefebvre, 1983; Taylor, 1948). The spray angle depends on the design of the swirl chamber and the discharge orifice (Rizk & Lefebvre, 1985). The diameter distribution resulting from the atomization process depends on the characteristics of the liquid sheet formed at the discharge orifice, such as the thickness of the film (Rizk & Lefebvre, 1980) and the liquid velocity. It also depends on the liquid properties (Rizk & Lefebvre, 1983) of the injected fuel, such as its density, viscosity and surface tension. The atomization process highly depends on characteristic parameters of the surrounding air stream (Dombrowski & Johns, 1963), such as pressure, relative velocity to the liquid and turbulence level, as turbulent fluctuations may amplify the surface waves, may reduce the breakup distance and influence the mean drop size (Fraser *et al.*, 1963).

Numerical simulations of the atomization process are a recent research topic. They rely on the development of specific numerical tools, such as interface tracking or capturing techniques (Desjardins *et al.*, 2008b; Menard *et al.*, 2007), which require a high level of precision and remain limited in terms of Reynolds number and geometry complexities. They are not yet suitable for the simulation of the real injection in an actual combustion chamber. The present study describes an alternative methodology to build the size and velocity distributions of the droplets to be used as boundary conditions for two-phase LES simulations. It relies on a minimal number of internal geometrical parameters for pressure-swirl atomizer of the simplex type, on balance equations applied to the gas-liquid mixture in the vicinity of the discharge orifice and on the knowledge of the mean drop size of the produced spray downstream of the injector discharge orifice .

To describe the dispersed phase most LES codes use a Euler/Lagrange (EL) method in which the gas phase is solved using an Eulerian method and the particles are tracked in a Lagrangian framework (Apte *et al.*, 2009; Sankaran & Menon, 2002; Patel & Menon, 2008). An alternative approach to describe the dispersed phase is to use Euler/Euler (EE) method in which both phases are solved using an Eulerian description. The dispersed phase is considered as a continuum built from the ensemble averaging of particles realizations (Février *et al.*, 2005; Kaufmann *et al.*, 2008; Riber *et al.*, 2009). Both phases are solved on the same mesh grid. Yet, in the EL approach, the particule tracking does not rely on the mesh grid. Quantities needed for the coupling between phases have to be interpolated at the droplet position or distributed at the mesh nodes. In the present study, the two approaches to describe dispersed two-phase flows are used in real gas turbine geometry (Boileau *et al.*, 2008a; Riber *et al.*, 2009; Senoner *et al.*, 2009b).

In such complex geometries, the EE and EL approaches also differ considerably when one considers the boundary conditions required to inject the fuel droplets from the atomizer. In the EL method, droplets can be injected directly at the discharge orifice. This is a simple and intuitive procedure even though its validity in this zone is unclear. On the initial conical liquid sheet pronounced waves appear, which cause the sheet to break

down into droplets and ligaments (Mansour & Chigier, 1991). In this area the notion of droplets is meaningless. Moreover, in the near zone of the atomizer discharge orifice the mass loading is so large and the interface so complex that drag and heat transfer laws used commonly for dispersed phase are wrong. Droplet sizes and velocity distributions can only be measured downstream of the atomizer out of the spray dense region. Despite these physical limitations, there is no practical difficulty in injecting particles directly at the injector location using the EL approach. The situation is different for EE techniques: since the injection section must be meshed and resolved, it is usually impossible to start the injection at the discharge orifice because this would require very small cell size. A simple solution in this case (Boileau *et al.*, 2008b; Martinez *et al.*, 2010) is to start the dispersed phase injection at a shifted location a few millimeters downstream of the discharge orifice where the spray has spread up to a larger cross section which can be meshed with affordable cell sizes. A model must then be developed to represent the phenomena occurring between the discharge orifice and the shifted plane where boundary conditions are imposed for the dispersed phase. Therefore in both cases (EE and EL), the near field zone of the injector is not realistic and only precise DNS simulations of the primary atomization reproduce this zone.

The presented methodology called FIM-UR, for *Fuel Injection Method by Upstream Reconstruction*, proposes an approach to specify the boundary conditions for fuel injection by pressure-swirl atomizer for both EE and EL methods within the same framework. First the geometrical parameters of the simplified atomizer are described and the principles of the fuel injection methodology are presented. Then in a second section the boundary condition for the EL approach is given at the discharge orifice of the atomizer. In a third section the boundary condition for the EE approach is provided on the discretized injection surface. The fourth section develops the one-dimensional mathematical model for air entrainment by the spray. It is adapted from Cossali (2001) to conical spray-pattern.

7.2 Principles of the FIM-UR methodology

When LES is performed on a liquid fueled combustion chamber, the main difficulty lies in the lack of information on the spray characteristics. The global parameters of the operating point and the precise geometry of the combustor are specified, but the internal geometry of the atomizer or the characteristic parameters of the atomized spray often remain unknown. In most cases, the only available parameters are the pressure drop or the spray cone angle at a calibrated flow rate (measured sometimes with an other liquid than the fuel) and the liquid flow rate at the considered operating point. The diameter distribution and the velocity field are sometimes (rarely) measured but only far downstream (about ten to twenty millimeters from the injector nozzle) in the combustion chamber.

The proposed methodology complements this partial information for a simplex type atomizer by using correlations and integral conservation laws. The design parameters of this *model* simplex atomizer are determined from the specified injection parameters of the real nozzle and empirical correlations.

7.2.1 The internal geometry parameters of the *model atomizer*

The internal geometry of a simplex atomizer (Bayvel & Orzechowski, 1993) is illustrated in Fig. 7.1. The liquid is injected tangentially through a single channel **1** of diameter d_p in the swirl chamber **2** of diameter D_S . The injection surface A_p of the swirl chamber is defined by $A_p = \frac{\pi d_p^2}{4}$. The discharge channel **3** ends up in an orifice of radius R_0 . The air core radius at the discharge orifice position has a radius R_a . The liquid comes out from the atomizer in a shape of a conical sheet of half angle θ_S and thickness t .

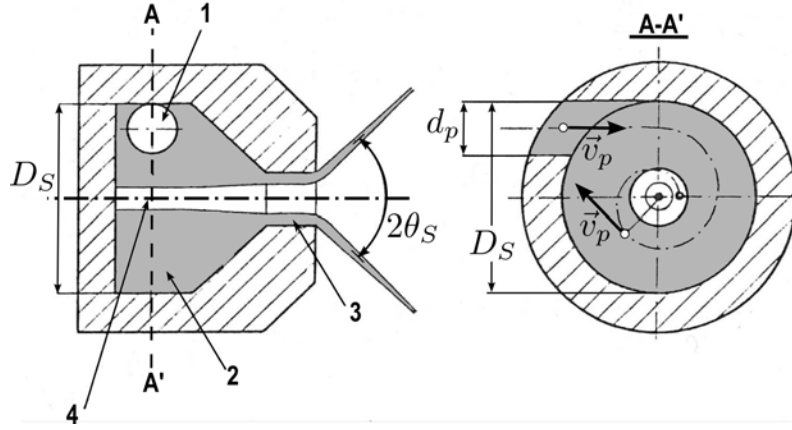


FIG. 7.1: Internal geometry parameters of a simplex atomizer. The grey shaded surfaces represent the liquid path, the hatched surfaces represent the solid body of the atomizer.

For a simplex atomizer, within the assumption of frictionless flow inside the atomizer, empirical formulations provide relationships between design parameters and flow characteristics. Inversely, having the discharge coefficient C_D or the spray angle θ_S for the *real* atomizer, empirical relationships allow to determine the contraction factor at the discharge orifice X and the internal design parameters for an *model* simplex atomizer (Lefebvre, 1989). This is presented in the next section.

7.2.2 Parameters definition

The spray formed at the exit of the atomizer is supposed to be axisymmetric around the axis (Ox) (Fig.7.2). Cylindrical coordinates (r, θ, x) are used. The discharge orifice is placed in the plane $x = x_0$, referred to the *real* injection plane. The half spray angle θ_S is defined in a meridian plane as the angle between the main spray direction (Ox') and the symmetry axis (Ox) (Fig.7.2). The radial position along the main spray direction at the abscissa x is written $R_S(x) = R_S^0 + (x - x_0) \tan \theta_S$ where R_S^0 is the radial position of the center of the cylindrical liquid film at $x = x_0$, see Fig. 7.2.

In the Euler/Lagrange approach, liquid droplets of diameter d are injected over a ring of outer radius R_0 (the radius of the discharge orifice) and inner radius R_a (the radius of the air core at $x = x_0$). The boundary conditions to be determined for the LES computations

with an EL approach are the air core radius R_a , the drop diameter d and velocities $\mathbf{u}_l^0$ on the ring $x = x_0, r_0 \in [R_a, R_0]$.

In the Euler/Euler approach, the strategy is to place the fuel injection downstream of the *real* injection plane to avoid to mesh the very narrow surface (less than 1 mm diameter) of the discharge orifice. This would lead to very small cell volumes and too small time-steps for a simulation of a combustion chamber. Therefore the *simulated* injection plane for EE is shifted to the position $x = x_i$. The translation distance of the injection plane is written $L_{\text{inj}} = x_i - x_0$. As the spray opens, the radius of the boundary surface R_i at the injection plane $x = x_i$ is a function of the translation distance. In a EE approach, the spray is locally defined by the mean drop diameter, the liquid volume fraction and the local velocity. For the injection boundary condition of LES computations with an EE approach the required values are the radius R_i of the *simulated* plane, the liquid volume fraction α_l^i , the droplet diameter d and the liquid velocity $\mathbf{u}_l^i$ profiles on the disk $x = x_i, r \in [0, R_i]$. In FIM-UR, these values in the plane $x = x_i$ are determined from their values in the plane $x = x_0$ through balance equations for the liquid phase between x_0 and x_i . The momentum exchange between the gaseous and liquid phases is taken into account through air entrainment. The momentum exchange $J_{s,l}(x_0, x_i)$ between the gas and liquid phase along the distance L_{inj} , and the mass flow-rate $\dot{m}_a$ of air entrained by the spray between x_0 and x_i are calculated using the analytical model of Cossali (2001).

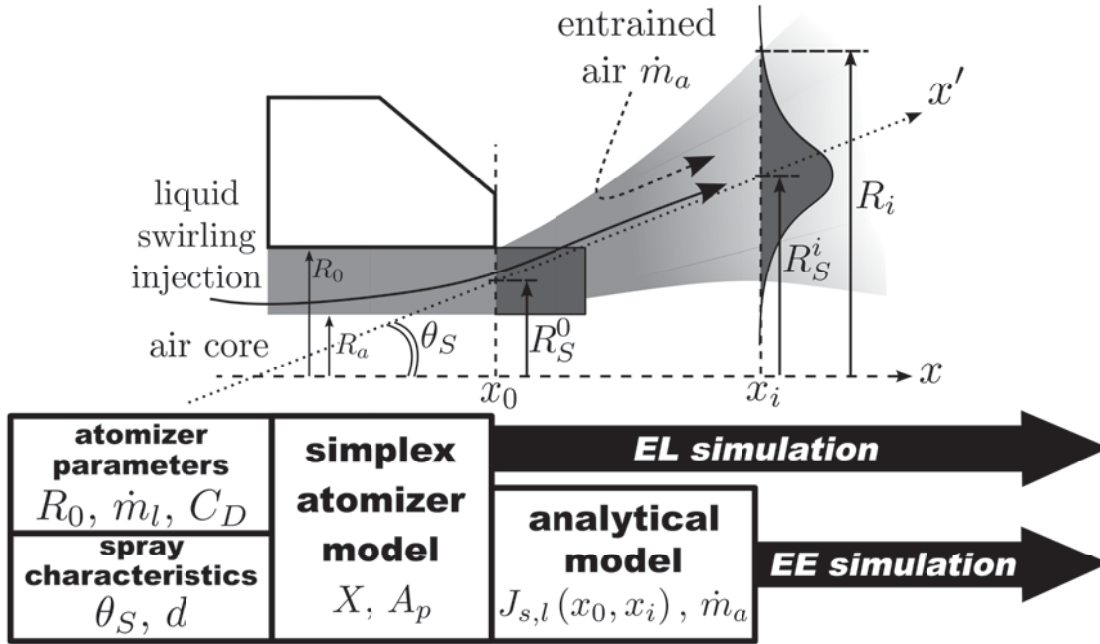


FIG. 7.2: FIM-UR : Definition of parameters and sketch of the methodology.

7.2.3 FIM-UR principles

The methodology for EE approach is developed into successive steps :

1. First, the design parameters of the *model* atomizer and the boundary values in the *real* injection plane $x = x_0$ are determined, following the empirical results of Lefebvre (1989).
2. Second, liquid and gas velocity components, as well as the liquid volume fraction profiles on the *simulated* injection plane $x = x_i$ are calculated by writing integral conservation equations for the spray between the planes $x = x_0$ and $x = x_i$. In this approach, the drop diameter is a direct input into the model: it is a characteristic parameter of the atomized spray. Two unclosed terms appear in these integral equations: the mass-flow rate of the air entrained by the spray m_a and the momentum loss of the spray $J_{s,l}$.
3. Third, these two unclosed terms m_a and $J_{s,l}$ are evaluated at the *simulated* injection plane $x = x_i$ by using an extension of Cossali's model adapted to hollow cone sprays. The extension and derivations are presented in section 7.5.

The input parameters to FIM-UR are then of two types:

- **atomizer parameters:** the mass flow-rate of the injected liquid m_l , the discharge orifice radius R_0 and the pressure drop coefficient C_D ;
- **downstream spray characteristics:** the half spray-angle θ_S , the characteristic diameter of the droplet distribution d after primary and secondary breakups are achieved.

For the EL approach, the model reduces to step **1** to build in the *real* injection plane $x = x_0$ the velocity and the density profiles of droplets of diameter d . No further analytical model (as in steps **2** and **3**) is required. For the EE approach, at the end of step **3** the outputs of FIM-UR are the velocity and volume fraction profiles of the spray of droplets with mean diameter d in the *simulated* injection plane $x = x_i$, but also the velocity profiles of the air entrained by the spray.

7.3 Building the injection profiles in the discharge orifice plane $x = x_0$

7.3.1 Evaluation of parameters for the *model* atomizer

For a simplex type atomizer, the highly swirled motion of the liquid fuel in the orifice channel creates an air vortex core at the center line. The empirical formula of Rizk & Lefebvre (1985) correlates the half-spray angle θ_S to the ratio X of the air core surface

A_{air} and the discharge orifice surface A_{exit} . The empirical formula can be rewritten as :

$$X = \frac{A_{air}}{A_{exit}} = \left(\frac{R_a}{R_0} \right)^2 = \frac{\sin^2 \theta_S}{1 + \cos^2 \theta_S} \quad (7.1)$$

From the inviscid theory, the discharge coefficient C_D can be related to X , also called the contraction factor of the orifice. In Eq. (7.2) the coefficient 1.17 is added to accommodate to the experimental values of Giffen & Muraszew (1953).

$$C_D = 1.17 \sqrt{\frac{(1 - X)^3}{(1 + X)}} \quad (7.2)$$

The formula of Taylor (1948), accommodated to the experimental data of Carlisle (Carlisle, 1955; Lefebvre, 1989), is used to estimate the tangential-injection surface A_p :

$$A_p = 20.73 C_D^2 A_0 \quad (7.3)$$

where $A_0 = \pi R_0^2$ is the total discharge orifice surface.

If the spray angle is unknown, the discharge coefficient of the real injector is determined directly from the injection pressure at a calibration flow rate m_l^c as :

$$C_D = \frac{m_l^c}{A_0 \sqrt{2 \rho_l \Delta P_i}} \quad (7.4)$$

Then A_p is estimated with Eq. (7.3), and θ_S is estimated from Eqs. (7.1) and (7.2).

7.3.2 Evaluation of injection values in the *real* injection plane $x = x_0$

The velocity profiles in the discharge orifice are defined as simply as possible. As pointed out by Rizk & Lefebvre (1985), the liquid follows a swirl motion and has no radial velocity at the discharge orifice. For a simplex atomizer, the swirl motion is due to the tangential injection of liquid in the swirl chamber (Fig. 7.1). It is assumed that the liquid flow is rotating as a solid body. The tangential velocity is then proportional to the ratio $m_l/\rho_l A_p$, and set to the radial position. The liquid volume fraction reflects the presence of the air core, where it is zero. The profiles in the discharge orifice ($x = x_0$) are then given by :

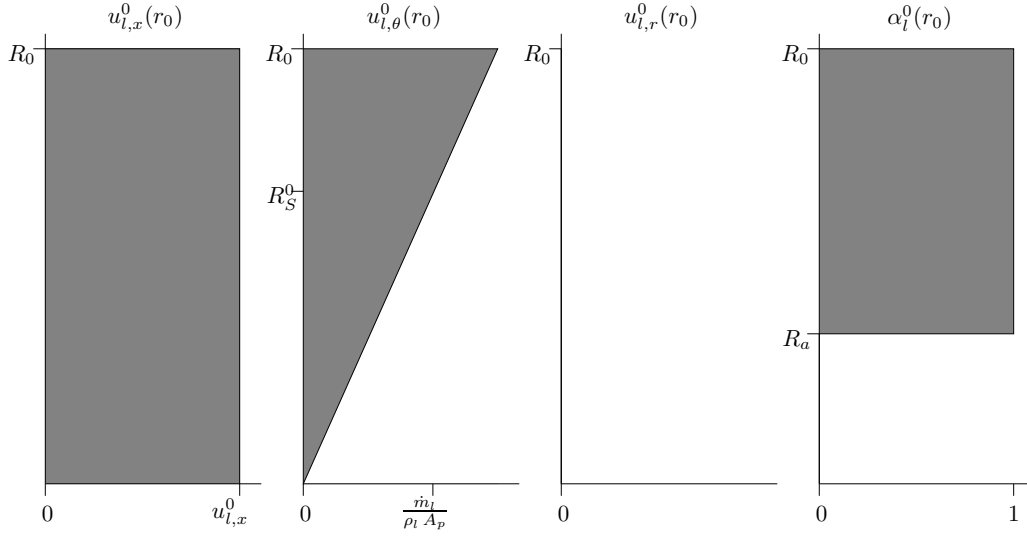
$$u_{l,r}^0(\theta, r_0) = 0 \quad (7.5)$$

$$u_{l,\theta}^0(\theta, r_0) = \frac{m_l}{\rho_l A_p} \frac{r_0}{R_S^0} \quad (7.6)$$

$$u_{l,x}^0(\theta, r_0) = \frac{m_l}{\rho_l \pi R_0^2 (1 - X)} \quad (7.7)$$

$$\alpha_l^0(\theta, r_0) = \begin{cases} 0 & \text{if } r_0 \in [0, R_a] \\ 1 & \text{if } r_0 \in [R_a, R_0] \end{cases} \quad (7.8)$$

where R_S^0 stands for the center position of the liquid sheet : $R_S^0 = \frac{R_0 + R_a}{2}$. These profiles are displayed in Fig. 7.3.


 FIG. 7.3: *Liquid variable profiles in the discharge orifice plane $x = x_0$.*

7.4 Spray evolution from $x = x_0$ to $x = x_i$

From the *real* injection plane ($x = x_0$) to the *simulated* one ($x = x_i$), the evolution of the profiles must be modelled in order to simplify integral balances of mass and momentum.

- The profiles in plane $x = x_i$ are related to the discharge orifice profiles on plane $x = x_0$ by ensuring global laws of conservation for mass and momentum of the liquid phase.
- The momentum exchange between the liquid and the gas phases is restricted to the drag force, responsible for air entrainment by the spray.

7.4.1 Liquid velocity profiles and liquid volume fraction

In the *simulated* injection plane at $x = x_i$, the following assumptions are used to specify the droplet and velocity distributions:

1. The liquid spray keeps its axi-symmetrical shape around the (Ox) axis.
2. The radial variation of the axial velocity is neglected.
3. A gaussian profile is assumed for the liquid-volume fraction.

This leads to the following expressions of the liquid volume fraction and velocity components in the injection plane $x = x_i$:

$$u_{l,r}^i(\theta, r) = u_{l,r}^i(r) \quad (7.9)$$

$$u_{l,\theta}^i(\theta, r) = u_{l,\theta}^i(r) \quad (7.10)$$

$$u_{l,x}^i(\theta, r) = u_{l,x}^{i \text{ mean}} \quad (7.11)$$

$$\alpha_l^i(\theta, r) = \alpha_{l \text{ max}}^i \cdot e^{\frac{-(r-\mu)^2}{\sigma^2}} \quad (7.12)$$

Eqs. (7.9) to (eq:03d) introduce 4 parameters ($u_{l,x}^{i \text{ mean}}$, $\alpha_{l \text{ max}}^i$, μ and σ) and 2 functions ($u_{l,r}^i(r)$ and $u_{l,\theta}^i(r)$) to be determined. These quantities are determined from conservative balances between $x = x_0$ and $x = x_i$, leading to the final profile shapes given in Fig. 7.5.

L1 Conservation of the injected-liquid mass.

The liquid mass flow rate through the disk $x = x_i, r \in [0, R_i]$ is equal to the total injected liquid mass flow rate m_l .

L2 Conservation of the spray angle.

The maximum of the liquid volume fraction is located along the main spray direction line (Fig. 7.2).

L3 Non-evaporating monodisperse spray.

The injected spray does not evaporate in the near field $x \in [x_0, x_i]$. The drag force is the single force that will be considered acting on the liquid phase. It can be evaluated as if the spray contains only spherical droplets of constant diameter d .

L4 Conservation of axial momentum.

The momentum exchange between the liquid and the ambient fluid (air) is most prominent in the (Ox) direction and will be neglected in the perpendicular directions. Therefore they keep their initial velocity radial and azimuthal components.

L5 Conservation of kinetic momentum.

As a consequence of the previous hypothesis, the droplet trajectory projected in a plane perpendicular to the (Ox) injection direction follows a ballistic trajectory.

These conservation laws ignore the presence of the liquid sheet which could modify the drag force effect and could distribute differently the transverse velocity.

7.4.2 Radial and azimuthal components of the droplet velocity at $x = x_i$

Following the conservation law **L5** the radial and azimuthal components of the droplet velocity are not modified by the momentum exchange between the liquid and the gas phase in the short domain between $x = x_0$ and $x = x_i$. In Fig. 7.4, planes $x = x_0$ and $x = x_i$

are displayed in the line of sight (Ox). A droplet initially emitted at a radial position $r_0 \in [0, R_0]$ in the plane $x = x_0$, follows a straight trajectory when projected on the plane perpendicular to the injection direction, reaching the plane $x = x_i$ at the radial distance $r \in [0, R_i]$.

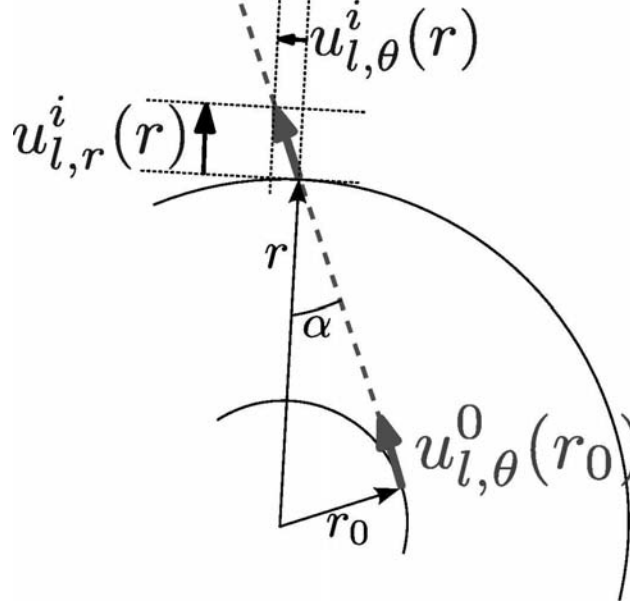


FIG. 7.4: Projection of the ballistic trajectory of the droplet in the plane normal to the injection direction (Ox).

As the radial velocity is null on the discharge orifice plane $x = x_0$, the radial and azimuthal velocity components in the injection plane $x = x_i$ are given by :

$$u_{l,r}^i(r) = u_{l,\theta}^0(r_0) \cos \alpha = u_{l,\theta}^0(r_0) \frac{\sqrt{r^2 - r_0^2}}{r} \quad (7.13)$$

$$u_{l,\theta}^i(r) = u_{l,\theta}^0(r_0) \sin \alpha = u_{l,\theta}^0(r_0) \frac{r_0}{r} \quad (7.14)$$

where the angle α is defined in Fig. 7.4 by the projection of radial positions of the droplet.

Eq. (7.14) can be seen as the conservation of the angular momentum of the droplets around the (Ox) axis.

If the distance L_{inj} between the real and the simulated injection plane is small enough, the conservation law **L2** and the intercept theorem ensure that r_0 and r are related by :

$$\frac{r}{r_0} = \frac{R_S^i}{R_S^0} \quad (7.15)$$

Combining Eqs. (7.6) and (7.13-7.15), the liquid radial and azimuthal velocities on the

injection plane are related to the discharge orifice parameters as :

$$u_{l,r}^i(r) = \frac{m_l}{\rho_l A_p} \sqrt{1 - \left(\frac{R_S^0}{R_S^i}\right)^2} \frac{r}{R_S^i} \quad (7.16)$$

$$u_{l,\theta}^i(r) = \frac{m_l}{\rho_l A_p} \frac{R_S^0}{R_S^i} \frac{r}{R_S^i} \quad (7.17)$$

7.4.3 Liquid mass flow rate at $x = x_i$

The conservation law **L1** for liquid flow rate yields :

$$m_l = \int_0^{R_i} \int_0^{2\pi} \rho_l u_{l,x}^i \alpha_l^i r d\theta dr \quad (7.18)$$

Hypothesis **L2** leads to $\mu = R_S(x_i) = R_S^0 + (x_i - x_0) \tan \theta_S \equiv R_S^i$. Using the simplified profile forms Eqs. (7.11) and (7.12), the previous equation can be integrated :

$$m_l = \pi \rho_l u_{l,x}^i \alpha_{l,max}^i \left[\sigma^2 \left(1 - \exp\left(-\frac{R_i^2}{\sigma^2}\right) \right) + \sigma R_S^i \bar{\pi} \operatorname{erf}\left(\frac{R_i}{\sigma}\right) \right] \quad (7.19)$$

To ensure that the gaussian profile of the liquid volume fraction, given by Eq. (7.12), covers the entire spray radial extension, the value of the liquid volume fraction at the spray edges is set to 2% of the maximal value of the liquid volume fraction : $\alpha_l^i(R_i) = 0.02 \alpha_{l,max}^i$. This additional condition gives the gaussian profile width : $\sigma^2 = -(R_i - R_S^i)^2 / \ln 0.02$.

7.4.4 Axial liquid momentum flux at $x = x_i$

From assumptions **L3** and **L4**, the axial liquid momentum flux through plane $x = x_i$, $J_{l,x}^i$, can be deduced from the axial liquid momentum flux through plane $x = x_0$, $J_{l,x}^0$, and the momentum sink between the plane $x = x_0$ and $x = x_i$, $J_{s,l}(x_0, x_i)$. The latter is only due to the momentum exchange between the gas and liquid phases through the drag force. The balance of momentum yields :

$$J_{l,x}^i = J_{l,x}^0 + J_{s,l}(x_0, x_i) \quad (7.20)$$

The fluxes $J_{l,x}^0$ and $J_{l,x}^i$ can be calculated by integration over the discharge orifice plane and the injection plane :

$$J_{l,x}^0 = \int_0^{R_0} 2\pi \rho_l \alpha_l^0 (u_{l,x}^0)^2 r dr = m_l u_{l,x}^0 \quad (7.21)$$

$$J_{l,x}^i = \int_0^{R_i} 2\pi \rho_l \alpha_l^i (u_{l,x}^i)^2 r dr = m_l u_{l,x}^i \alpha_{l,mean}^i \quad (7.22)$$

The momentum sink $J_{s,l}(x_0, x_i)$ will be calculated in section 7.5, by applying the integral model developed by Cossali (2001).

7.4.5 Determination of the axial velocity component and the liquid volume fraction profiles

Combining Eqs. (7.7), (7.21) and (7.22), the liquid axial velocity can be evaluated by :

$$u_{l,x}^i \text{ mean} = u_{l,x}^0 + \frac{J_{s,l}(x_0, x_i)}{m_l} \quad (7.23)$$

Having $u_{l,x}^i \text{ mean}$, an evaluation of R_i is required to calculate $\alpha_l^i \text{ max}$ and σ from Eq. (7.19).

$$\alpha_l^i \text{ max} = \frac{m_l}{\pi \rho_l u_{l,x}^i \text{ mean} \left[\sigma^2 \left(1 - \exp \left(-\frac{R_i^2}{\sigma^2} \right) \right) + \sigma R_S^i \bar{\pi} \operatorname{erf} \left(\frac{R_i}{\sigma} \right) \right]} \quad (7.24)$$

$$\sigma^2 = \frac{-(R_i - R_S^i)^2}{\ln 0.02} \quad (7.25)$$

7.4.6 Gas axial velocity at $x = x_i$

In the *simulated* plane at $x = x_i$, gas boundary conditions are also required. Experimental results (Prosperi *et al.*, 2007) demonstrate that the flow rate of the air entrained by the spray scales like the distance to the atomizer-discharge orifice to the power 3/2 and the gas density to the power 5/6 in the near field of a hollow-cone spray. These results also testify to the validity of the integral model derived by Cossali (2001) in the near-field of the atomizer.

To obtain the axial gas velocity fields one additional hypothesis is formulated :

L6 The axial velocity for the gas phase is independent of the radial coordinate :

$$u_{g,x}(x, \theta, r) = u_{g,x}(x). \text{ At } x = x_i, \text{ one writes } u_{g,x}(x_i) = u_{g,x}^i \text{ mean}.$$

The mass-flow rate of the air entrained by the spray at the axial position x_i can therefore be expressed as $m_a = \pi R_i^2 \rho_g u_{g,x}^i$. According to Prosperi *et al.* (2007) it can be written as :

$$m_a = K_a \rho_g^{5/6} (x_i - x_0)^{3/2} \quad (7.26)$$

where K_a is a constant for a given atomizer (Prosperi *et al.*, 2007), and will be determined in section 7.5, by applying the integral model developed by Cossali (2001). Combining these equations, the gas axial velocity can be finally written :

$$u_{g,x}^i = \frac{K_a (x_i - x_0)^{3/2}}{\pi R_i^2 (\rho_g)^{1/6}} \quad (7.27)$$

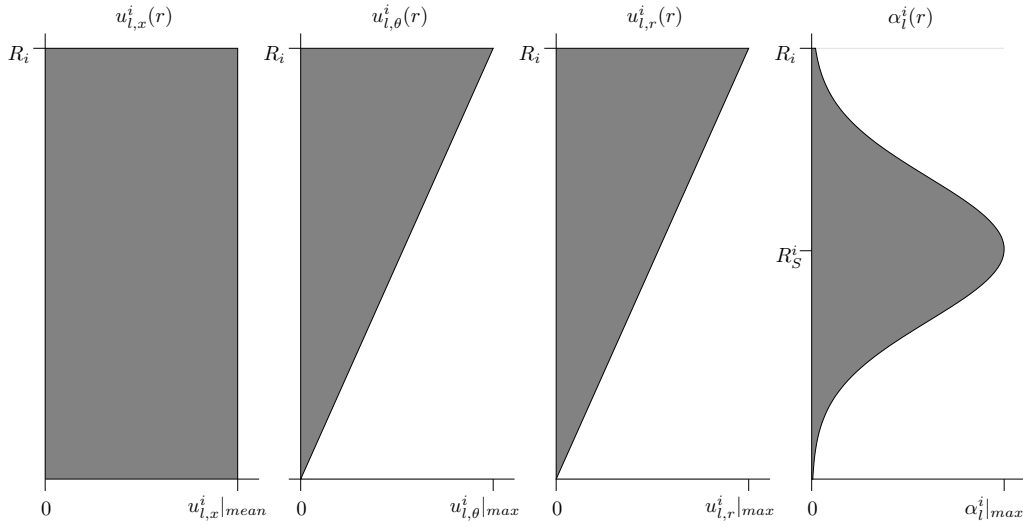


FIG. 7.5: Summary of the liquid profiles on the injection plane $x = x_i$.

Finally, the conservation laws and hypotheses (**L1-L6**) allow to determine the 4 parameters ($u_{l,x}^i|_{max}$, $\alpha_l^i|_{max}$, μ and σ) and the 2 functions ($u_{l,r}^i(r)$ and $u_{l,\theta}^i(r)$). The resulting velocity profiles are sketched in Fig. 7.5. At this stage, the missing parameters are the outer radius R_i of the spray, the entrained air by the spray m_a and the momentum exchange $J_{s,l}(x_0, x_i)$.

7.5 Model for air entrainment by a hollow-cone spray

7.5.1 Integral model for gas entrainment by full-cone sprays

The last step of the FIM-UR methodology is the evaluation of air entrainment, and more specifically the values of R_i , m_a and $J_{s,l}(x_0, x_i)$.

Cossali (2001) wrote a model giving the air entrainment coefficient Λ for full cone sprays. It is a non-dimensional coefficient measuring the mass flow rate of the air entrained by the spray per unit of distance from the discharge orifice. This model is recalled here before being extended to hollow cone sprays. Note that Cossali's model assumed shapes for the velocity profiles which are different from the FIM-UR profiles. Therefore the specific profiles used in this section are only to evaluate air entrainment unknowns with the model of Cossali (2001).

Limiting solutions of the gas entrainment equation in the near and far-field of the injector nozzle have been derived from conservative balances of the air/liquid mixture. They provide the entrained mass flow rate by the spray as a function of the mass flow rate

of the injected liquid, the gas properties, the mean drop size and the axial distance from the discharge orifice. The main hypotheses used by Cossali (2001) are listed below :

- A1** The liquid spray is injected into a quiescent atmosphere at uniform pressure.
- A2** The model is derived for a pressurized atomizer producing a full-cone spray pattern.
- A3** The liquid and gas phases are in steady state.
- A4** The liquid is non-evaporating, and the momentum exchange between phases is reduced to the total drag force on all spray droplets.
- A5** The drag force applied in the model is the aerodynamic drag on spherical sphere.
- A6** The profiles of liquid and gas velocity, as well as droplet number density are self-similar.

In the previous sections, the state of gas atmosphere surrounding the atomizer nozzle was not discussed. In gas-turbine combustion chambers, the atomizer is usually located on the axis of the gas recirculation zone, ensuring that the gas is almost quiescent at this location, and justifies the validity of assumption **A1**. In other cases, one must keep in mind that the flow-rate of the air entrained by the spray will be underestimated especially in configurations with large flow rates. Assumptions **A2** to **A5** are in agreement with the assumptions made in the previous paragraph §7.4. To meet assumption **A6**, self-similarity profiles must be defined for a hollow-cone spray and the non-dimensional coordinate ξ (in (Cossali, 2001), p. 355) should be re-defined to follow the spray main direction (Ox').

7.5.2 Definition of self-similarity profiles for the integral model for gas entrainment into hollow-cone sprays

In most fuel atomizers used in gas turbine, the spray is a hollow cone and the model of Cossali (2001) for full-cone sprays must be modified.

For a hollow-cone spray of θ_S half spray angle, the non-dimensional coordinate (Pope, 2000) ξ is defined below :

$$\xi = \frac{r}{R_S(x)} = \frac{r}{R_S^0 + (x - x_0) \tan \theta_S} \quad (7.28)$$

Assuming self-similarity of gas mean axial velocity $u_{g,x}$, liquid mean axial velocity $u_{l,x}$ and volume fraction profiles α_l , and that similar gas and liquid velocity distribution (in

(Cossali, 2001), Eq. (20), p. 357), profiles may be written introducing two function the functions f and φ :

$$u_{g,x}(r, x) = W(x) f(\xi) \quad (7.29)$$

$$u_{l,x}(r, x) = U(x) f(\xi) \quad (7.30)$$

$$\alpha_l(r, x) = N(x) \varphi(\xi) \quad (7.31)$$

where the function W , U and N describes the axial variations of the profiles amplitudes.

For the velocity, the similarity profile f correspond to a turbulent round jet in a quiescent atmosphere of the same fluid. The maximum of the profile is set at the centerline:

$$f(\xi) = \frac{1}{(1 + a\xi^2)^2} \quad (7.32)$$

where a is defined so as to have the jet's half width on the direction (Ox') (ie) $f(1) = 1/2$. Then $a = \frac{1}{2} - 1$.

For the liquid volume fraction, the similarity profile φ is defined to have a minimum value at the centerline:

$$\varphi(\xi) = \frac{b\xi^2}{(1 + c\xi^2)^4} \quad (7.33)$$

The parameters b and c are defined to ensure first - that the maximal value of the φ function is 1, and secondly - that this maximum is located along (Ox') (ie) $\varphi(1) = 1$. This leads to $c = \frac{1}{3}$ and $b = \frac{256}{81}$.

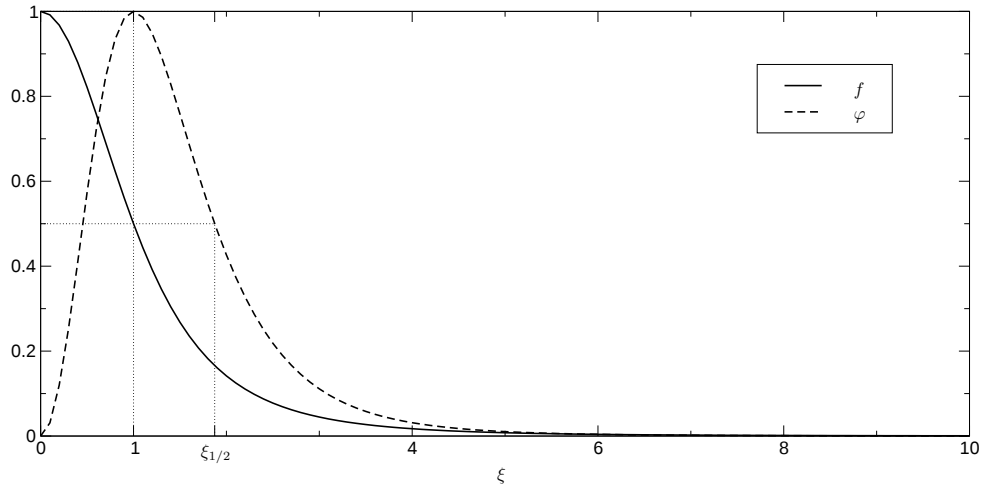


FIG. 7.6: Representation of the similarity functions f and φ as a function of ξ .

The radius of the injection external boundary R_i in the plane $x = x_i$ can be defined as the half-width of the φ function, or larger. This defines a criterion for the injection boundary condition:

$$R_i \geq \xi_{1/2} R_S^i \quad (7.34)$$

$$\text{where: } \varphi(\xi_{1/2}) = \frac{1}{2} \text{ (ie) } \xi_{1/2} = 1.87397 \quad (7.35)$$

7.5.3 Evaluation of the air entrainment coefficient

The entrained air m_a is related to the liquid flow rate and to the distance from the discharge orifice through the air entrainment coefficient $\Lambda(x)$: $m_a(x) = \Lambda(x) m_l (x - x_0) / 2R_0$. The entrainment coefficient is given in the near field of the injector nozzle by (Cossali, 2001):

$$\Lambda(x) = H_0 \left(\frac{2R_0 \mu}{m_l} \right)^{1/6} \left(\frac{\rho}{\rho_l} \right)^{5/6} \left(\frac{2R_0}{d} \right)^{2/3} \left(\frac{x - x_0}{2R_0} \right)^{1/2} \quad (7.36)$$

$$\text{where: } H_0 = \frac{4}{3} \left(\frac{4}{\pi} \right)^{1/3} \left(\frac{2\pi Q^2 R C_M^{2/3}}{M B^{1/3} C^{2/3}} \right)^{1/2} \quad (7.37)$$

$$\text{and: } m_a(x_0) = 0 \quad (7.38)$$

The quantities Q , M , B , C , and R have to be calculated by integration of the functions f and φ . They appear in the derivation of Cossali (2001) in the integral balance equations of the liquid and gas phases. To obtain the integrals B , C and R , the formula (3.197.1) p. 314 of Gradshteyn & Ryzhik (1980) has been used. ${}_2F_1$ states for the first Gauss hypergeometric function, which is tabulated in Tab. 7.1.

$$\text{gas flow-rate } Q = \int_0^\infty f(\xi) \xi \, d\xi = \frac{1}{2 \left(\frac{1}{2} - 1 \right)} \quad (7.39)$$

$$\text{gas momentum flux } M = \int_0^\infty f^2(\xi) \xi \, d\xi = \frac{1}{6 \left(\frac{1}{2} - 1 \right)} \quad (7.40)$$

$$\text{liquid flow-rate } B = \int_0^\infty f(\xi) \varphi(\xi) \xi \, d\xi = \frac{32}{45} {}_2F_1 \left(2, 2; 6; 4 - 3 \frac{\bar{2}}{2} \right) \quad (7.41)$$

$$\text{liquid momentum flux } C = \int_0^\infty f^2(\xi) \varphi(\xi) \xi \, d\xi = \frac{64}{189} {}_2F_1 \left(4, 2; 8; 4 - 3 \frac{\bar{2}}{2} \right) \quad (7.42)$$

$$\text{drag force}^1 R = \int_0^\infty f(\xi) f(\xi)^{2/3} \varphi(\xi) \xi \, d\xi = \frac{8}{19} {}_2F_1 \left(\frac{10}{3}, 2; \frac{22}{3}; 4 - 3 \frac{\bar{2}}{2} \right) \quad (7.43)$$

${}_2F_1 \left(2, 2; 6; 4 - 3 \frac{\bar{2}}{2} \right)$	0.85998
${}_2F_1 \left(4, 2; 8; 4 - 3 \frac{\bar{2}}{2} \right)$	0.79844
${}_2F_1 \left(\frac{10}{3}, 2; \frac{22}{3}; 4 - 3 \frac{\bar{2}}{2} \right)$	0.81465

TAB. 7.1: Tabulated values for ${}_2F_1$.

¹The exponent value of $2/3$ comes from the correction part of Lee & Reitz (1999) for the Stokes drag. The $2/3$ coefficient is preferred to the very close value 0.687 of the Schiller & Nauman (1935) correction, as it leads to an analytical antiderivative function.

The coefficient C_M is calculated from the discharge-orifice values $u_{l,x}^0$ and α_l^0 defined in Eqs. (7.7) and (7.8).:

$$C_M = \frac{R_0^2 \int_0^{R_0} \left[\alpha_l^0(r_0) u_{l,x}^0(r_0) \right]^2 r_0 dr_0}{2 \left(\int_0^{R_0} \alpha_l^0(r_0) u_{l,x}^0(r_0) r_0 dr_0 \right)^2} = \frac{1}{1 - X} \quad (7.44)$$

The expression of Eq. (7.36) can now be used directly to obtain the K_a coefficient required in the injection model for expression (7.27):

$$K_a = H_0 \left(\frac{2R_0 \mu}{m_l} \right)^{1/6} \left(\frac{2R_0}{d} \right)^{2/3} \frac{m_l}{(2R_0)^{3/2} \rho_l^{5/6}} \quad (7.45)$$

Moreover, the momentum exchange term $J_{s,l}(x_0, x_i)$ required for expression (7.23) is also evaluated from the air entrainment coefficient (Cossali, 2001):

$$J_{s,l}(x_0, x_i) = -\Lambda^2(x_i) \frac{m_l^2 M}{8\pi R_0^2 \rho Q^2} \quad (7.46)$$

These two last expressions allow to close the system for the determination of boundary profiles in the (EE) approach.

7.6 Utilisation de FIM-UR avec l'approche Euler-Euler en configuration réelle

7.6.1 Résumé de la méthodologie FIM-UR pour l'approche Euler-Euler

Un module de pré-traitement² a été développé pour AVBP. Il permet de créer les fichiers d'entrées nécessaires pour le traitement des condition limites³ dans AVBP en appliquant les étapes successives de la méthodologie FIM-UR.

Le point délicat de la mise en place de la méthodologie FIM-UR est le choix du paramètre L_{inj} qui conditionne le rayon R_i de la surface d'injection dans la simulation. Ce point est détaillé au paragraphe suivant §-7.6.2. Dans la méthodologie FIM-UR présentée à la Fig. 7.7, le rayon R_i de la surface d'injection du calcul est un paramètre d'entrée de la méthode. La valeur du décalage de l'injection L_{inj} est obtenue en assurant que le critère sur R_i énoncé à l'Eq. (7.34), qui découle du choix des profils pour l'évaluation de l'entraînement d'air par le spray, soit vérifié.

La Fig. 7.7 résume l'ensemble de l'approche FIM-UR. L'intégrale I_α définie par l'Eq. (7.50) n'est pas calculée analytiquement comme à l'Eq. (7.19) mais numériquement

²Le module est disponible dans la banque d'outils d'AVBP sous le nom de `makeinject`.

³Le fichier de paramètres des conditions limites correspond au fichier `solutBound.h5` dans AVBP.

en utilisant la discrétisation de la surface d'injection du domaine de calcul. On assure ainsi que dans la simulation le débit injecté correspond bien au débit imposé dans le calcul.

$$R_S^0 = \frac{1 + \overline{X}}{2} R_0 \quad (7.47)$$

$$R_S^i = R_S^0 + L_{\text{inj}} \tan \theta_S \quad (7.48)$$

$$A_u = \frac{1}{\rho_l (1 - X)} - \Lambda^2(x_i) \frac{M}{8\rho Q^2} \quad (7.49)$$

$$I_\alpha = \int_0^{R_i} \int_0^{2\pi} e^{\frac{-(r-\mu)^2}{\sigma^2}} r d\theta dr \quad (7.50)$$

$$\Lambda(x_i) = H_0 \left(\frac{2R_0 \mu}{m_l} \right)^{1/6} \left(\frac{\rho}{\rho_l} \right)^{5/6} \left(\frac{2R_0}{d} \right)^{2/3} \left(\frac{L_{\text{inj}}}{2R_0} \right)^{1/2} \quad (7.51)$$

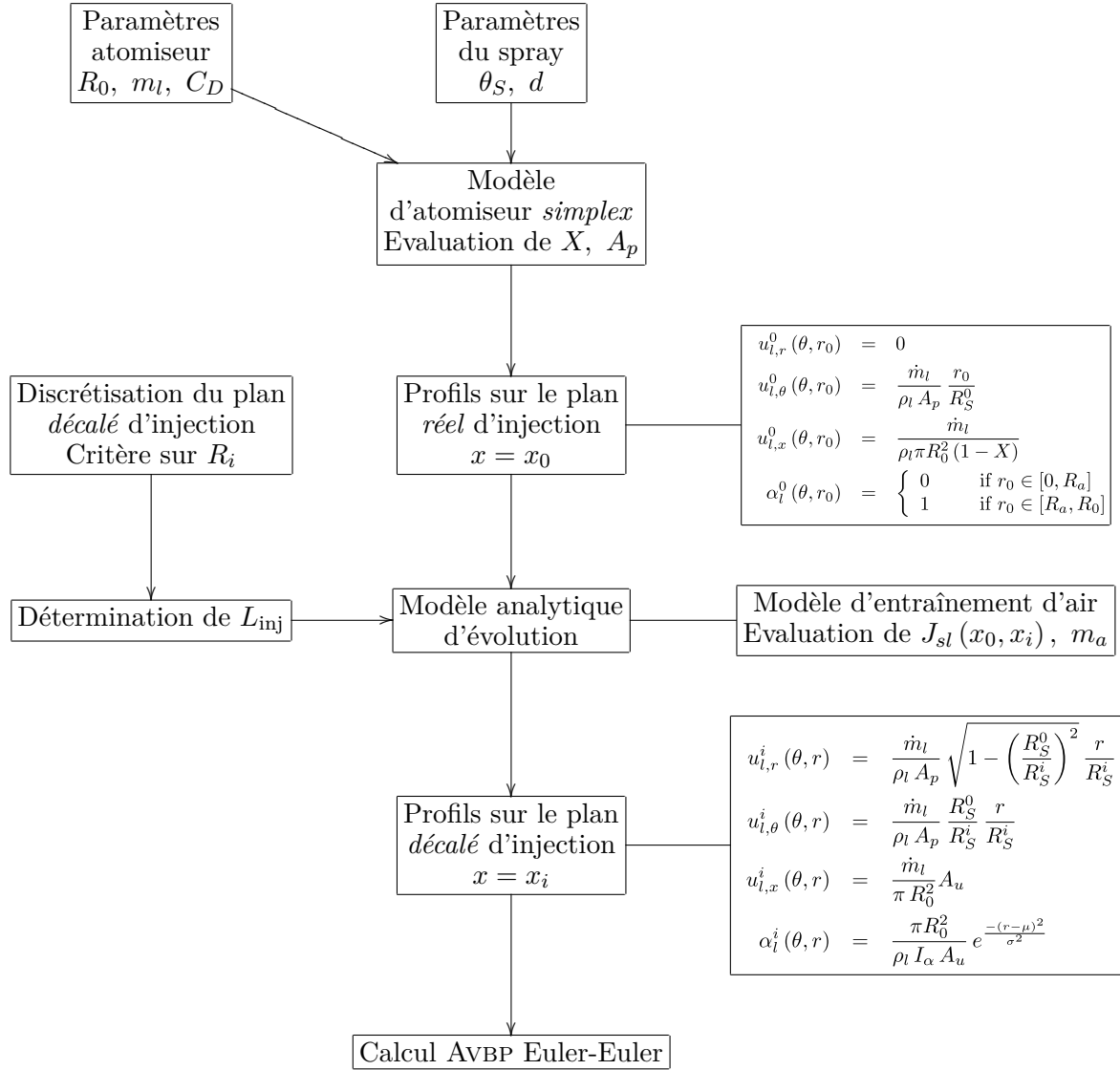


FIG. 7.7: Résumé de la méthodologie FIM-UR pour l'approche Euler-Euler.

7.6.2 Décalage de l'injection dans une géométrie complexe

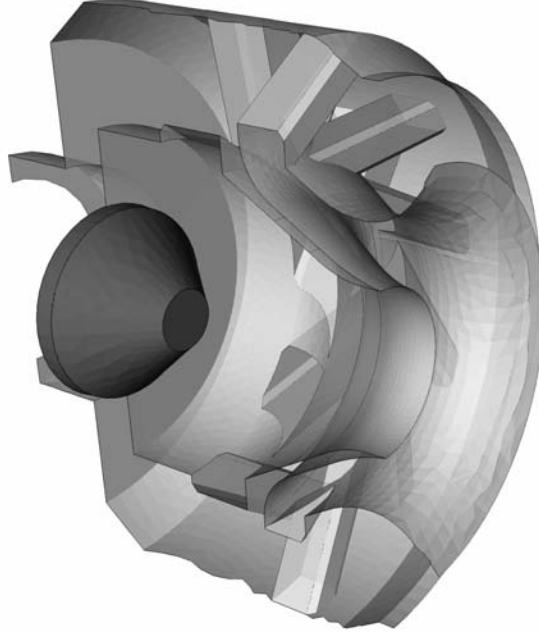


FIG. 7.8: Vue d'un système d'injection diphasique d'une chambre de combustion TURBOMECA (avec l'aimable autorisation de TURBOMECA).

Dans le cas d'une configuration industrielle, l'atomiseur liquide est placé au centre du système d'injection d'air. La géométrie du système complet est complexe et influence énormément la dynamique et la structure de l'écoulement. On peut rarement se permettre de modifier la géométrie dans cette zone sensible. Sur la Fig. 7.8, la géométrie d'un système d'injection TURBOMECA est représentée. On distingue, en sombre, la tête de l'atomiseur au centre d'une cavité complexe dans laquelle l'écoulement d'air débouche des deux systèmes de vrilles. Etendre l'atomiseur par un cône solide pour décaler l'injection de plusieurs millimètres comme cela est fait Fig. 7.9, peut modifier complètement la structure de l'écoulement.

La méthode retenue est de laisser l'ingénieur calcul choisir la surface d'injection *décalée* en fonction de la géométrie de la configuration qu'il a à traiter. A lui de trouver comment élargir la surface d'injection qui pourra être maillée avec des cellules de taille raisonnable, tout en minimisant l'impact sur la structure de l'écoulement.

Dans le cas de l'injecteur de la configuration MERCATO, présenté à la Fig. 7.10(a), les côtés de l'hexagone délimitant le corps métallique de l'atomiseur sont prolongés jusqu'à la position du plan d'injection Fig. 7.10(b). La surface d'injection obtenue peut être correctement maillée, afin d'y définir des profils et de diluer le spray. Dans ce cas, le plan d'injection n'est pas décalé le long de la direction d'injection afin que la modification géométrique reste le plus limitée possible. De plus, la surface d'injection (Fig. 7.10(b)) n'est pas un disque mais un hexagone. Le rayon R_i est alors défini comme le rayon du cercle inscrit dans l'hexagone, cf. Tab. 9.4.

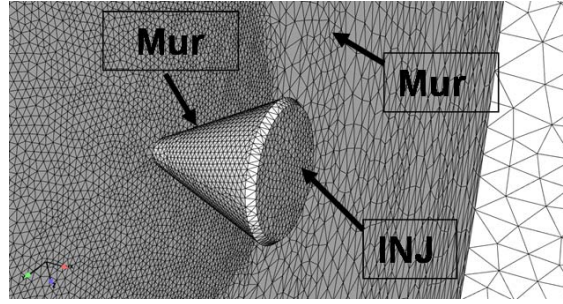
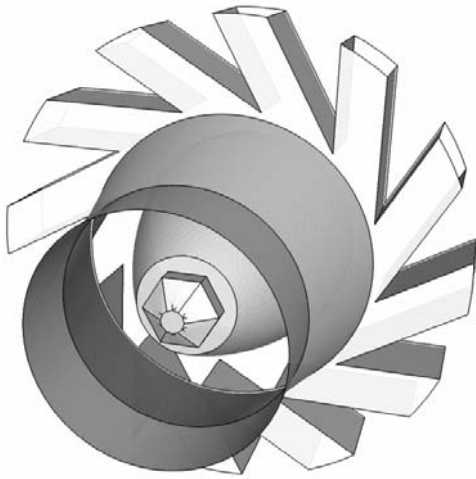
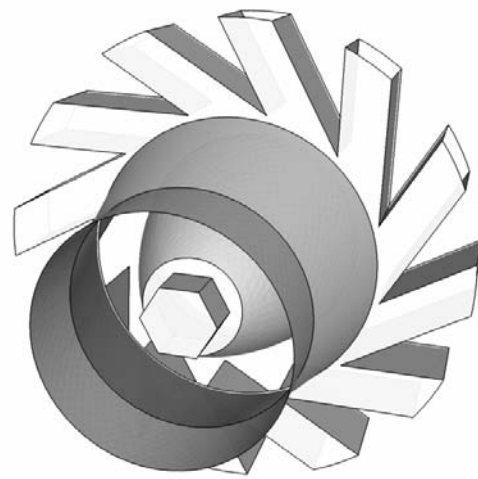


FIG. 7.9: *Extrait de la thèse de Martinez (2009) : stratégie de décalage d'injection retenue pour la simulation de l'injection d'un jet Diesel dans une atmosphère au repos.*



(a) Injecteur Makila avec l'atomiseur réel.



(b) Injecteur Makila avec l'atomiseur élargi.

FIG. 7.10: *Détail du module d'injection et mise en évidence de la modification géométrique de la géométrie externe de l'atomiseur.*

Le sens de rotation du liquide n'a pas été discuté précédemment, dans la configuration MERCATO cette information ne nous a pas été donnée. De ce fait, le sens de rotation a été arbitrairement choisi identique à celui de l'écoulement gazeux vrillé.

Enfin, la condition limite d'injection liquide doit être cohérente avec les conditions aux limites des surfaces adjacentes à la surface d'injection. La surface débitante est à l'extrémité d'un support, donc les surfaces adjacentes sont des parois. Afin d'éliminer d'éventuels problèmes numériques, les vitesses axiales débitantes des phases gazeuse et dispersée sont mises à zéro sur les noeuds communs à l'injection et aux parois. Le profil est ensuite lissé par une fonction en tangente hyperbolique et recalé pour assurer le débit imposé. La forme du profil lissé de vitesse axiale liquide et celle du profil de fraction volumique de liquide sont présentées sur la Fig. 7.11. Le maximum de vitesse est supérieur à la valeur analytique $u_{i,x}^i$ afin de respecter le débit imposé.

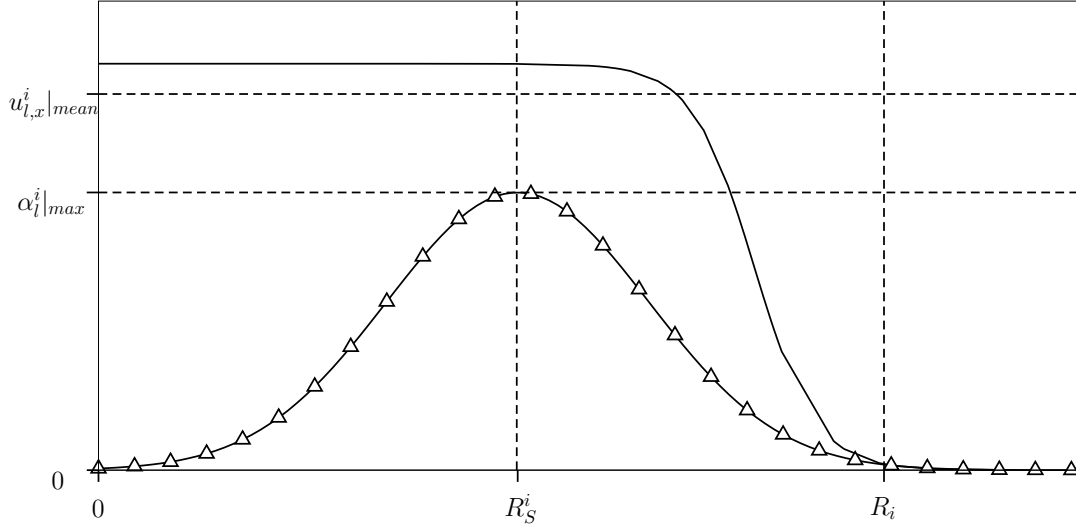


FIG. 7.11: Profils d'injection adaptés aux parois adjacentes. — profil de vitesse axiale liquide débitante, - - profil de fraction volumique de liquide débitant. NB : Les échelles sont arbitraires.

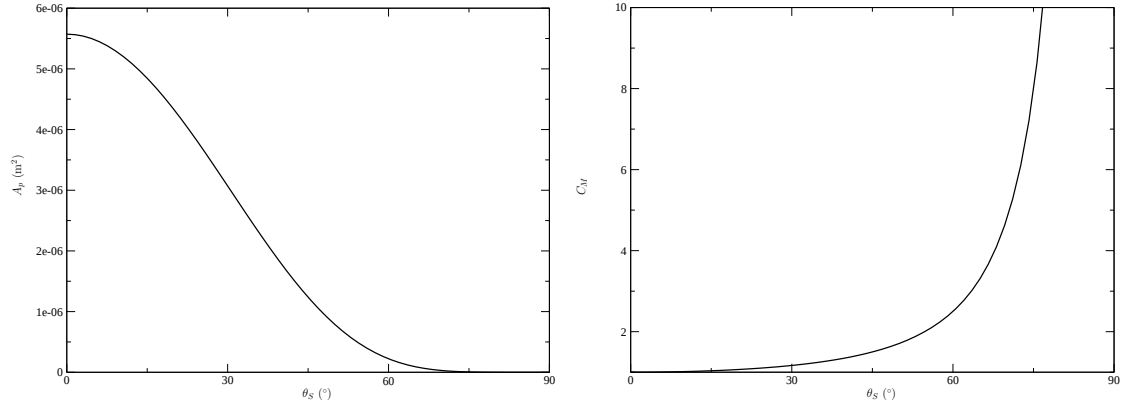
7.6.3 Etude de sensibilité du modèle à ses paramètres d'entrée

Cette étude de sensibilité a été initiée par le travail de stage de Vu (2009). Les principales remarques qui peuvent être retenues sont les suivantes.

La constante A_u est peu sensible à l'effet du débit. L'augmentation de $u_{l,r}^i$, $u_{l,\theta}^i$ et $u_{l,x}^i$ en fonction du débit liquide est linéaire, tandis que le profil de α_l^i est invariable à la seule variation de débit.

Le coefficient d'entraînement d'air par le spray Λ étant proportionnel à $\rho^{5/6}$, le débit *massique* d'air entraîné est également proportionnel à $\rho^{5/6}$. Ainsi la vitesse gazeuse est proportionnelle à $\rho^{-1/6}$ (cf. Eq. (7.27)) elle diminue lorsque la pression augmente, tandis que le débit massique augmente.

Lorsque l'on fait varier l'angle de spray de 0 à 90°, le coefficient de contraction de l'orifice de sortie de l'atomiseur X croît de manière monotone de 0 à 1. La valeur $X = 0$ correspond à un jet plein non vrillé, tandis que la valeur théorique $X = 1$ correspond au cas limite où toute la section de sortie est bouchée par le cœur d'air. Le liquide ne sort que tangentiellement de l'orifice. Le coefficient de débit C_D diminue lorsque l'angle de spray augmente, ainsi la surface A_p diminue également lorsque l'angle de spray augmente (Fig. 7.12(a)). Par conséquent lorsque l'angle de spray augmente, le modèle FIM-UR prévoit une rotation plus rapide du liquide. Cette évolution paraît correcte. Le coefficient C_M de perte de charge sur la section de sortie, varie alors de 1 à + comme montré à la Fig. 7.12(b). A distance constante du plan de sortie L_{inj} , et en conservant tous les autres paramètres du modèle constant, le coefficient d'entraînement d'air $\Lambda(x_i)$ varie proportionnellement à $C_M^{1/3}$ (Eq. (7.44)). Finalement, on peut observer que le modèle FIM-UR prédit un entraînement d'air qui augmente avec l'angle de spray. Cette évolution semble



(a) Evolution de la surface d'injection tangentielle dans l'atomiseur pour $R_0 = 0.25$ mm en fonction de θ_S .
 (b) Evolution du coefficient perte de charge sur la section de sortie en fonction de θ_S .

FIG. 7.12: Evolution des paramètres A_p et C_M de l'atomiseur en fonction du demi-angle de spray θ_S .

également intuitivement correcte.

L'étude de sensibilité réalisée brièvement montre que le modèle FIM-UR prédit des évolutions réalistes des composantes de vitesses en fonction du débit, de la vitesse d'air entraîné en fonction de la pression, du coefficient de débit et de la vitesse de rotation du liquide en fonction de l'angle de spray.

Une validation complète du modèle n'est pas possible car il n'y a pas de mesure en sortie d'injecteur. Ce point faible pourrait être amélioré par confrontation avec des calculs de DNS d'atomisation.

Quatrième partie

Simulation numérique aux grandes échelles de la configuration MERCATO à carburant liquide

Introduction

Cette quatrième et dernière partie du manuscrit regroupe les travaux réalisés sur la configuration MERCATO. Cette configuration correspond à un *sous-système* d'une chambre de combustion diphasique, selon la définition proposée au Chapitre 1. Le banc d'essai MERCATO représente un excellent cas test pour la validation de la simulation des écoulements dispersés dans une géométrie complexe. Comme la configuration PRECCINSTA, la configuration MERCATO est un cas test de validation pour AVBP, utilisé comme configuration cible pour différents travaux de développement : étude des modélisations physiques (turbulence, évaporation, combustion, allumage), études des approches diphasiques (Lagrangienne, Eulérienne), études des méthodes numériques pour la phase dispersée. Les travaux présentés dans ce manuscrit se concentrent sur des points de fonctionnement *non-réactif*. Il s'agit d'évaluer la méthode Eulérienne et d'étudier l'écoulement diphasique évaporant et l'interaction du spray et de la vapeur avec l'écoulement turbulent vrillé caractéristique des chambres de combustion.

Le Chapitre 8 présente en détail la géométrie du banc d'essai ainsi que les données expérimentales collectées sur les points de fonctionnement retenus pour les simulation numériques présentées dans cette thèse. Le Chapitre 9 énumère, dans une première section, l'ensemble des paramètres numériques employés pour les simulations aux grandes échelles avec l'approche Euler-Euler *mésoscopique*. Les simulations réalisées emploient le modèle thermodynamique KERO_LUCHE présenté au Chapitre 6 pour représenter le kérosène liquide injecté lors des campagnes expérimentales sur le banc MERCATO. L'injection du carburant par l'atomiseur pressurisé-swirlé est prise en compte en appliquant la méthodologie FIM-UR présentée au Chapitre 7. Les calculs monophasique et diphasique sont validés par comparaison des statistiques issues des simulations aux mesures expérimentales disponibles. La structure des écoulements est également étudiée en détail, notamment les aspects instationnaires des structures de l'écoulement. Le Chapitre 10 s'attache à comparer dans un premier temps les résultats des simulations Euler-Euler aux résultats des simulations Euler-Lagrange réalisées par J.M. Senoner. Enfin les différentes stratégies numériques présentées au Chapitre 5 sont appliquées et confrontées les unes aux autres afin d'identifier la stratégie la plus fiable pour être utilisée à termes par les ingénieurs et motoristes.

Chapitre 8

Campagnes expérimentales sur la configuration MERCATO

Sommaire

8.1	Le banc d’essai MERCATO	163
8.2	Campagnes de mesures sur le banc MERCATO	165
8.2.1	Point de fonctionnement considéré	165
8.2.2	Données expérimentales collectées	166
8.2.3	Evaluation de l’erreur liée aux mesures	167
8.2.4	Comparaison des résultats numériques aux grandeurs expérimentales	170

8.1 Le banc d’essai MERCATO

Le travail qui est présenté dans ce chapitre sur la configuration MERCATO s’inscrit dans une collaboration de longue date entre TURBOMECA, l’ONERA et le CERFACS via le financement de plusieurs thèses numériques et expérimentales : (Lamarque, 2007; García-Rosa, 2008). Ce travail a reçu également le soutien financier du projet TIMECOP-AE, acronyme de Towards Innovative Methods for Combustion Prediction in Aero-Engines. Ce projet fait partie du 7^{ème} projet cadre lancé par la Commission Européenne pour le financement de la recherche et du développement. TIMECOP-AE vise à promouvoir la collaboration des instituts de recherche et des industriels européens sur le développement et la validation des outils numériques de simulations aux grandes échelles. Ce programme se concentre sur les aspects de modélisation et de validation des écoulements diphasiques réactifs en balayant un ensemble d’applications numériques et expérimentales allant des cas les plus simples aux configuration de bancs expérimentaux dont les écoulements turbulents diphasiques et réactifs sont fortement tridimensionnels. Le banc MERCATO est un excellent démonstrateur de ce que l’on appelle les *configurations expérimentales complexes*.

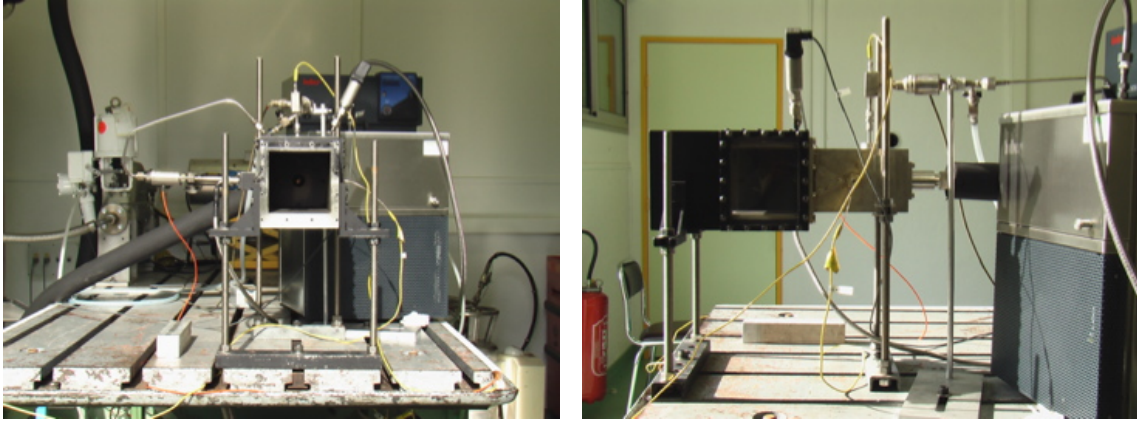
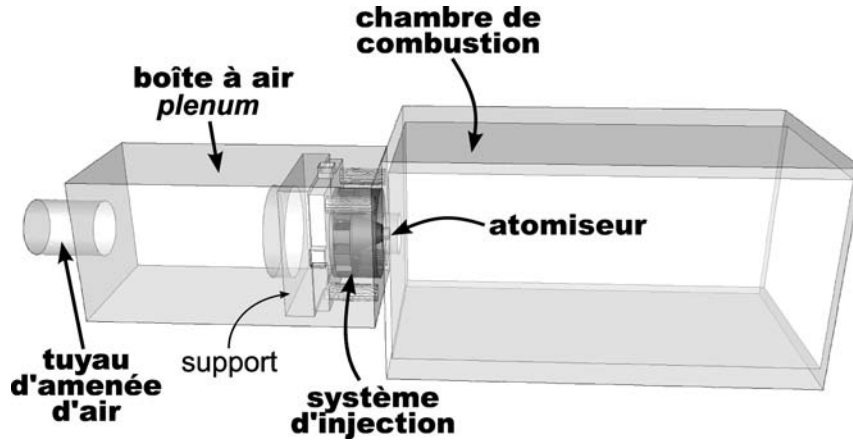


FIG. 8.1: Vues du montage expérimental sur le banc MERCATO. Crédit photo : García-Rosa (2008).

Deux photos du banc d'essai MERCATO, installé à l'ONERA sur le site du Fauga-Mauzac sont reproduites Fig. 8.1. Le travail de R. Lecourt, et de ses stagiaires et doctorants successifs, a permis de collecter un grand nombre de données expérimentales sur le banc MERCATO, acronyme de Moyen d'Étude et de Recherche en Combustion Aérobie par Techniques Optiques. Ce banc d'essai dédié aux écoulements diphasiques et notamment à l'étude de l'allumage en conditions de haute altitude, est une configuration complexe. En effet si la géométrie de la chambre de combustion reproduite à la Fig. 8.2 est très simple (parois planes et lisses) afin de permettre des accès optiques, le système d'injection correspond à un injecteur pilote Makila DLN modifié, conçu par Turbomeca. À l'extrémité de la tête d'injection, se trouve un gicleur (ou atomiseur) Delavan pour le kérosène liquide. L'injecteur est composé d'un tourbillonneur radial (ou *swirler* en anglais) à 12 canaux qui débouchent sur un diffuseur cylindrique droit de 3 cm de diamètre connecté à la chambre de combustion. La chambre de combustion a une section carrée de $13 \times 13 \text{ cm}^2$ et une longueur de 28.5 cm. L'écoulement dans cette chambre de combustion expérimentale est tout à fait représentatif des écoulements dans les foyers aéronautiques. Injecté par le tuyau d'amenée dans le plénum, l'air entre ensuite tangentielllement dans les canaux du tourbillonneur qui lui impriment un fort mouvement de giration autour de l'axe de la chambre. L'air sortant du *swirler* passe dans un diffuseur de 10 mm et de section circulaire de diamètre $D = 30 \text{ mm}$. Le changement brusque de section à l'entrée dans la chambre de combustion génère des zones de recirculation dans les coins de la chambre. Le jet d'air vrillé tend à s'ouvrir mais les zones de recirculation au coin limitent son expansion radiale, créant une forme en cône. Lorsque le mouvement de giration est suffisamment fort, une zone de recirculation se forme au centre de la chambre de combustion. Ce type d'écoulement est très utile pour un foyer aéronautique puisque dans un cas réactif, la zone de recirculation emprisonne des gaz chauds à proximité de l'arrivée de carburant et de comburant. Ceci permet de stabiliser la flamme dans le brûleur sur une large plage de fonctionnement.

FIG. 8.2: *Domaine retenu pour le calcul de la chambre de combustion MERCATO.*

8.2 Campagnes de mesures sur le banc MERCATO

8.2.1 Point de fonctionnement considéré

Depuis la thèse de García-Rosa (2008), un grand nombre de mesures optiques ont été effectuées sur le banc d'essai MERCATO pour plusieurs points de fonctionnement notamment dans le cadre du projet TIMECOP-AE (Lecourt, 2008b,a). Dans ce travail de thèse, les calculs présentés ne se concentrent que sur un seul point de fonctionnement réalisé à pression atmosphérique. Le point de fonctionnement est défini par le débit et la température de l'air. Les expérimentateurs définissent alors un débit réduit W_R (Eq. (8.1)). Le point de fonctionnement correspond dans cette dénomination au point à $W_R = 0.32$. Dans les travaux présentés aux chapitres suivants, pour le même point de fonctionnement, trois cas sont étudiés pour lesquels seul le débit de kérosène liquide varie. Les valeurs des débits sont données Tab. 8.1.

$$W_R = \frac{m_a \sqrt{T_g}}{P} \quad \text{en kg. } \bar{K}/\text{s}/\text{bar} \quad (8.1)$$

Cas	Température de l'air (K)	Débit massique de l'air (g/s)	Débit massique du carburant (g/s)	Richesse à l'injection
I: monophasique	463	15	0	0
II: diphasique - A	463	15	1	0.97
III: diphasique - B	463	15	2	1.96

TAB. 8.1: *Cas à pression atmosphérique simulés dans ce travail.*

L'étude successive de ces 3 cas permet de caractériser d'abord l'écoulement gazeux seul, puis l'écoulement diphasique et enfin l'influence du débit liquide.

Cas	Distance du fond de chambre des traversées optiques (mm)
I : monophasique	6, 26, 56, 86, 116
II : diphasique - A	6, 26, 56 ²
III : diphasique - B	6

TAB. 8.2: Position des plans de mesure pour les 3 cas retenus dans cette thèse.

8.2.2 Données expérimentales collectées

Le point de fonctionnement qui est étudié dans cette thèse correspond pour les expérimentateurs au point de mise en place des diagnostics optiques LDA-PDA réalisés au cours de la thèse de García-Rosa (2008). Ainsi ces cas tests bénéficient d'une redondance des mesures collectées qui permet d'obtenir une marge d'erreur sur les valeurs mesurées (cf. §-8.2.3).

La LDA, acronyme de *Laser Doppler Anemometry*¹ est une technique optique non-intrusive qui permet d'obtenir la vitesse locale des particules. Deux faisceaux laser cohérents se croisent pour former un volume de franges d'interférences. Lorsqu'une particule traverse le réseau d'interfranges, elle diffuse un signal lumineux dont la fréquence est proportionnelle à l'épaisseur de l'interfrange et à la vitesse de la particule. En utilisant deux paires de faisceaux laser orientées à 90° on peut ainsi mesurer deux composantes simultanément.

La PDA, pour *Phase Doppler Anemometry* est une analyse détaillée du signal émis par la particule traversant le réseau d'interférences. Pour cela, on utilise deux photo-récepteurs peu distants : le déphasage entre les deux signaux reçus, issus de la même particule, renseigne sur le trajet différent de deux rayons dans la goutte. Il est alors possible d'en déduire le rayon de la particule. L'écartement entre les deux photo-récepteurs détermine la taille minimale des gouttes qui peuvent être enregistrées par cette méthode.

Ainsi la technique LDA-PDA permet d'acquérir simultanément la taille et deux composantes de vitesses d'une particule enregistrée. Il existe un certain nombre de critères d'acceptation des mesures, de limitations optiques et de paramètres d'échantillonnage. Des explications détaillées sont fournies dans la thèse de García-Rosa (2008). Pour le **Cas I**, la mesure LDA est effectuée sur de fines gouttelettes d'huile d'olive injectées en amont du plenum. Pour les cas diphasiques **Cas II** et **Cas III**, la mesure LDA-PDA est effectuée sur les gouttelettes de kérosène injectées via l'atomiseur *Delavan*. Les mesures sont réalisées sur plusieurs plans transversaux à différentes distances du fond de chambre (Tab. 8.2). Sur chaque plan, les points de mesure sont réalisés sur une traversée horizontale et une traversée verticale, comme schématisé Fig. 8.3. La présence d'une pellicule de liquide formée par le kérosène sur les hublots de visualisation limite le nombre de plans de mesures pour les cas diphasiques.

¹Anémométrie laser à effet Doppler

²Les traversées à 56 mm ont été réalisées en forçant le débit d'air à 18 g/s au lieu de 15 g/s afin de

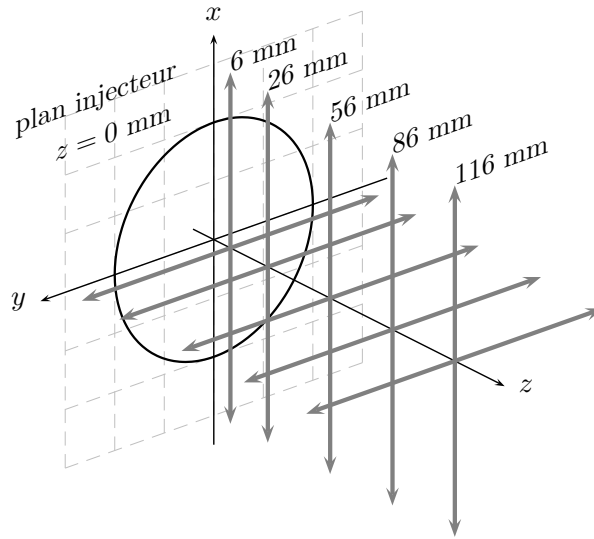


FIG. 8.3: Croquis des plans des traversées optiques.

8.2.3 Evaluation de l'erreur liée aux mesures

L'écoulement étant non-réactif, il peut être stabilisé et mesuré en continu sans risque de dommage pour la chambre. Les débits d'air et de liquide sont contrôlés au cours des séquences. Le débit d'air est maintenu à 0.7 g/s près et le débit de liquide est maintenu à 0.1 g/s près. Un thermocouple dans le plenum permet de contrôler la température de l'air. La température du kérosène liquide n'est pas asservie, elle varie de 15°C à 30°C selon les jours des expériences et le niveau de kérosène liquide dans la cuve hermétique. Un capteur de pression absolue est placé dans un coin de la chambre de combustion. Un capteur de pression différentielle mesure la perte de charge à travers le système d'injection.

Les mesures faites en anémométrie laser sont redondantes. Ainsi les expérimentateurs ont pu étudier la reproductibilité des expériences menées sur le banc MERCATO. A partir de la comparaison des différents lots de mesures enregistrées, il est possible d'obtenir une erreur liée à la mesure expérimentale. Cette erreur intègre alors les déviations autour du point de fonctionnement liées au mode opératoire (contrôle des débits, pression atmosphérique...) et les déviations liées à la méthode optique employée (ensemencement, calibration du système, propreté des hublots de visualisation...). L'ensemble de ces erreurs peuvent se compenser sur les résultats de vitesse et de diamètre. Ainsi la mesure de la déviation des résultats n'est pas à proprement parler l'erreur globale de mesure. Elle permet en tout cas de donner une idée de la plage de valeurs autour de la mesure dans laquelle les résultats numériques pourront être considérés *en accord* avec l'expérience. Pour les mesures sur le champ de gouttes de kérosène, les profils ne sont mesurés que sur des demi-traversées en raison d'un accès optique réduit. En effet, pour la mesure de diamètre, l'angle de visée, imposé par l'indice de réfraction du kérosène (García-Rosa, 2008), est inférieur à 180°.

limiter l'influence du film liquide sur les fenêtres de visualisation.

A titre d'exemple, les profils de vitesse axiale moyenne et RMS³ enregistrés à 26 mm du fond de chambre au cours de différentes séquences de mesures sont superposés pour la phase gazeuse Fig. 8.4 et pour la phase liquide Fig. 8.5. Les profils de diamètre moyen et RMS des gouttes de kérosène sont présentés Fig. 8.6.

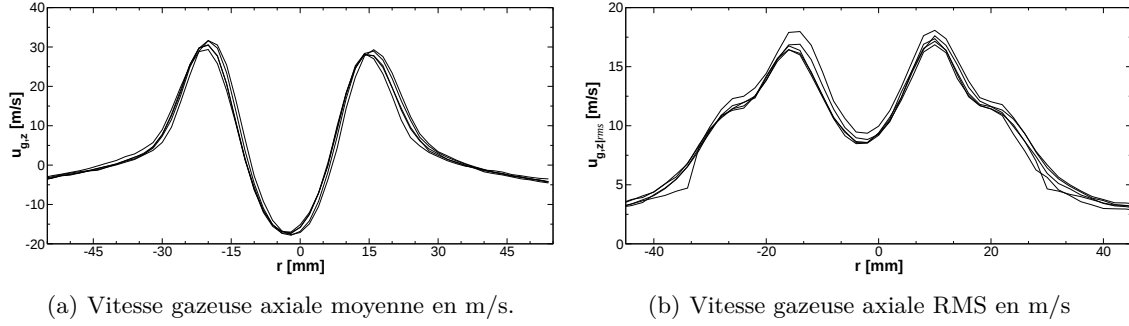


FIG. 8.4: Superposition des mesures expérimentales issues des lots 026th02, 026th03, 026tv01, 026tv02, 026tv03 et 026tv04 (García-Rosa, 2008).

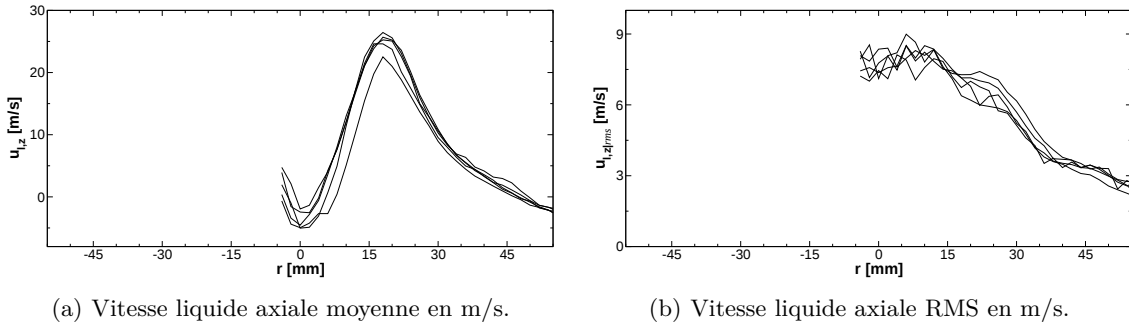


FIG. 8.5: Superposition des mesures expérimentales issues des lots 26th01_lda, 26th02_lda, 26th03_lda, 26tv01_lda, 26tv01h_lda et 26tv02h_lda (García-Rosa, 2008).

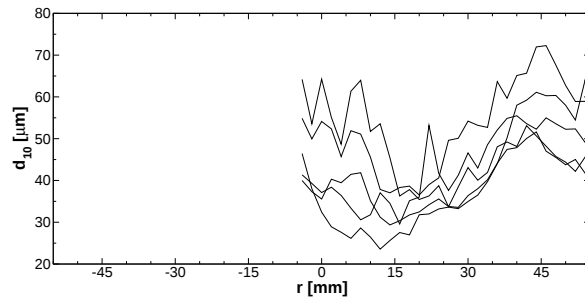


FIG. 8.6: Diamètre moyen de la fonction de distribution locale de gouttes, donné en μm . Superposition des mesures expérimentales issues des lots 26th01_lda, 26th02_lda, 26th03_lda, 26tv01_lda, 26tv01h_lda et 26tv02h_lda (García-Rosa, 2008).

³La vitesse RMS pour *root mean square* correspond à l'écart type de la vitesse instantanée à la vitesse moyenne sur le temps d'enregistrement.

Une mesure de la déviation des données expérimentales est donnée en pourcentage au Tab. 8.3. La moyenne et l'écart-type des différents lots sont calculées pour chaque composante. L'erreur correspond au maximum du profil d'écart-type adimensionné par le maximum du profil moyen.

Grandeur Mesurée	Ecart-type entre les lots
$\overline{u_{g,z}}^{\text{LDA}}$	9%
$\overline{u_{g,z}}^{\text{LDA}}_{\text{rms}}$	12 %
$\overline{u_{g,y}}^{\text{LDA}}$	13%
$\overline{u_{g,y}}^{\text{LDA}}_{\text{rms}}$	6%
$\overline{u_{l,z}}^{\text{LDA}}$	18 %
$\overline{u_{l,z}}^{\text{LDA}}_{\text{rms}}$	10%
$\overline{u_{l,y}}^{\text{LDA}}$	30%
$\overline{u_{l,y}}^{\text{LDA}}_{\text{rms}}$	20%
d_{10}	25%

TAB. 8.3: Estimation de l'erreur liée au mode opératoire et au système anémométrique laser, calculée sur les lots de profils obtenus à $z = 26$ mm du fond de chambre.

8.2.4 Comparaison des résultats numériques aux grandeurs expérimentales

Définition des moyennes obtenues par anémométrie laser

Afin d'éviter que les grandeurs mesurées en LDA ou PDA ne soient biaisées par le taux de passage des traceurs, les expérimentateurs utilisent une pondération de la grandeur mesurée par le temps de transit $\tau^{(k)}$ du traceur k enregistré ($k \in [1, N_p]$) à l'instant $t^{(k)}$ (García-Rosa, 2008). L'estimateur de moyenne des mesures expérimentales, noté $\overline{\cdot}^{\text{LDA}}$, est donc défini comme la somme des grandeurs particulières mesurées pour l'ensemble des traceurs enregistrés :

$$\overline{u}_i^{\text{LDA}}(\mathbf{x}) = \frac{\sum_{k=1}^{N_p} \tau^{(k)} u_{p,i}^{(k)}(\mathbf{x}, t^{(k)})}{\sum_{k=1}^{N_p} \tau^{(k)}} \quad (8.2)$$

La variance des fluctuations de vitesses mesurées s'exprime alors :

$$\overline{u_i'^2}^{\text{LDA}}(\mathbf{x}) = \frac{\sum_{k=1}^{N_p} \tau^{(k)} \left[u_{p,i}^{(k)}(\mathbf{x}, t^{(k)}) - \overline{u}_i^{\text{LDA}}(\mathbf{x}) \right]^2}{\sum_{k=1}^{N_p} \tau^{(k)}} \quad (8.3)$$

Le diamètre moyen de la fonction de distribution locale de diamètre, noté d_{10} , se calcule de la même manière :

$$d_{10} = \frac{\sum_{k=1}^{N_p} \tau^{(k)} d_p^{(k)}(\mathbf{x}, t^{(k)})}{\sum_{k=1}^{N_p} \tau^{(k)}} \quad (8.4)$$

Les autres moments de la distribution locale de diamètre de gouttes ne sont pas utilisés dans ce travail, puisque les calculs réalisés utilisent une approche monodisperse.

Lien entre les moyennes expérimentales et le champ de vitesses pour la phase liquide

Rappelons que dans l'approche mésoscopique, la vitesse d'une particule k se décompose en une partie corrélée et une partie décorrélée :

$$u_{p,i}^{(k)}(\mathbf{x}, t) = \check{u}_{l,i}(\mathbf{x}, t) + u_{p,i}''^{(k)}(\mathbf{x}, t) \quad (8.5)$$

Ce formalisme *mésoscopique* eulérien introduit par Février *et al.* (2005) suppose que :

- les vitesses décorrélées de deux particules ne sont pas corrélées ;
- la vitesse décorrélée n'est pas corrélée spatialement au champ instantané de vitesses corrélées ;
- la vitesse décorrélée n'est pas corrélée spatialement au champ instantané de vitesse du fluide porteur.

Ainsi l'estimateur de vitesse moyenne LDA peut-être vu comme une moyenne temporelle de la vitesse mésoscopique. Afin d'alléger les notations, l'opérateur de moyenne temporelle $\frac{1}{T} \int_0^T \cdot dt$ est noté $\cdot$ et les variables $(\mathbf{x}, t)$ sont omises.

$$\overline{u_{l,i}}^{\text{LDA}}(\mathbf{x}, t) = \frac{\sum_{k=1}^{N_p} \tau^{(k)} \check{u}_{l,i}(\mathbf{x}, t^{(k)})}{\sum_{k=1}^{N_p} \tau^{(k)}} + \underbrace{\frac{\sum_{k=1}^{N_p} \tau^{(k)} u_{p,i}''^{(k)}(\mathbf{x}, t^{(k)})}{\sum_{k=1}^{N_p} \tau^{(k)}}}_{=0} \quad (8.6)$$

$$\equiv \frac{1}{T} \int_0^T \check{u}_{l,i}(\mathbf{x}, t) dt \equiv \check{u}_{l,i} \quad (8.7)$$

De la même manière, on peut décomposer la vitesse particulière dans l'estimateur de variance de vitesse LDA :

$$\overline{u_{l,i}'^2}^{\text{LDA}}(\mathbf{x}, t) = \frac{\sum_{k=1}^{N_p} \tau^{(k)} \left[\check{u}_{l,i}(\mathbf{x}, t^{(k)}) + u_{p,i}''^{(k)}(\mathbf{x}, t^{(k)}) - \overline{u_{l,i}}^{\text{LDA}}(\mathbf{x}) \right]^2}{\sum_{k=1}^{N_p} \tau^{(k)}} \quad (8.8)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{\sum_{k=1}^{N_p} \tau^{(k)} \left[\check{u}_{l,i}(\mathbf{x}, t^{(k)}) - \overline{u_{l,i}}^{\text{LDA}}(\mathbf{x}) \right]^2}{\sum_{k=1}^{N_p} \tau^{(k)}} + \frac{\sum_{k=1}^{N_p} \tau^{(k)} \left[u_{p,i}''^{(k)}(\mathbf{x}, t^{(k)}) \right]^2}{\sum_{k=1}^{N_p} \tau^{(k)}} \\ &+ \underbrace{\frac{\sum_{k=1}^{N_p} \tau^{(k)} 2 u_{p,i}''^{(k)}(\mathbf{x}, t^{(k)}) \left[\check{u}_{l,i}(\mathbf{x}, t^{(k)}) - \overline{u_{l,i}}^{\text{LDA}}(\mathbf{x}) \right]}{\sum_{k=1}^{N_p} \tau^{(k)}}}_{=0} \quad (8.9) \end{aligned}$$

$$\equiv \underbrace{\check{u}_{l,i}^2}_A + \underbrace{u_{p,i}''^2}_B - \check{u}_{l,i}^2 \quad (8.10)$$

Dans l'Eq. (8.10), le terme A correspond à l'agitation du mouvement mésoscopique, et le terme B correspond à l'agitation du mouvement décorrélé. Cette dernière peut être reliée à l'énergie décorrélée $\delta\check{\theta}_l$, en faisant une hypothèse d'isotropie :

$$u_{p,i}''^2 = \frac{2}{3} \delta\check{\theta}_l \quad (8.11)$$

Dans le cas où l'énergie décorrélée n'est pas transportée dans le système d'équations de la phase liquide, cette agitation peut être évaluée *a posteriori* en utilisant la corrélation établie pour un écoulement à l'équilibre par Février (2000) dans le cas d'une THI stationnaire et par Vance *et al.* (2006) dans un écoulement en canal plan. Cette dernière corrélation reproduite à l'Eq. (8.12) relie l'agitation du mouvement décorrélé à l'agitation du mouvement mésoscopique et à l'agitation du fluide porteur :

$$u_{p,i}''^2 = [\check{u}_{l,i} - \check{u}_{l,i}]^2 \left(\frac{[\check{u}_{l,i} - \check{u}_{l,i}]^2 [u_i - u_i]^2}{[\check{u}_{l,i} - \check{u}_{l,i}] [u_i - u_i]^2} - 1 \right) \quad (8.12)$$

Lien entre les moyennes expérimentales et le champ de vitesse pour la phase gazeuse

Dans le cas où la méthode PDA est appliquée pour mesurer le champ de vitesses de la phase gazeuse, le gaz estensemencé par de fines gouttelettes d'huile d'olive. L'hypothèse forte qui est faite dans ce cas là est que soit la vitesse des traceurs est parfaitement corrélée à la vitesse du fluide porteur, soit l'agitation des particules (terme B dans l'Eq. (8.10)), qui peut être assimilée à un mouvement Brownien, est en moyenne nulle car les conditions sont isothermes.

Ainsi les écritures données aux Eqs. (8.7) et (8.10) deviennent pour la phase gazeuse :

$$\overline{u_i}^{\text{LDA}} \equiv u_i \quad (8.13)$$

$$\overline{u_i'^2}^{\text{LDA}} \equiv u_i^2 - u_i \quad (8.14)$$

Lien entre le champ de vitesses mesurées et le champ de vitesses résolues

L'un des objectifs de cette thèse est de comparer les résultats numériques de différentes simulations aux mesures expérimentales. Les grandeurs résolues $\overline{u_i}$ ne correspondent pas directement aux grandeurs totales u_i mais sont filtrées spatialement. Le filtrage spatial de la méthode LES est noté $\widetilde{\cdot}$ pour les grandeurs de la phase gazeuse et $\widehat{\cdot}$ pour les grandeurs de la phase dispersée. Il n'est pas explicitement appliqué dans le code AVBP mais correspond à un filtrage sur la taille de la cellule duale. Dans le cas où l'écoulement est *très faiblement compressible* et si l'on suppose la taille du filtrage spatial petite par rapport aux structures spatiales du champ moyen, la moyenne temporelle des vitesses résolues est égale à la moyenne des vitesses réelles (Poinsot & Veynante, 2001) :

$$\overline{u_i}^{\text{LDA}} \equiv u_i = \widetilde{u_i} \quad (8.15)$$

Sous les mêmes hypothèses, la décomposition des fluctuations de vitesses en partie filtrée et non-filtrée conduit à (Poinsot & Veynante, 2001) :

$$\widetilde{u_i'^2} = \underbrace{\left(\widetilde{u_i^2} - \widetilde{u_i}^2 \right)}_C + \underbrace{\left(\widetilde{u_i^2} - \widetilde{u_i}^2 \right)}_D \quad (8.16)$$

Le terme C de l'Eq. (8.16) correspond à la variance du champ résolu. Le terme D se réécrit comme la moyenne de la variance de sous-maille : $\widetilde{u_i^2} - \widetilde{u_i}^2$.

Le terme D n'est pas reconstruit dans les statistiques issues des calculs et présentées dans la suite de cette Partie . On compare la mesure expérimentale à l'écart type des vitesses résolues :

$$\overline{u_i'^2}^{\text{LDA}} \equiv \left(\widetilde{u_i^2} - \widetilde{u_i}^2 \right) \quad (8.17)$$

Si l'hypothèse de faible compressibilité est plutôt valide pour la phase gazeuse, puisque les simulations réalisées sont en conditions isothermes à faible nombre de Mach, cette hypothèse n'est pas vraiment validée pour la phase liquide. On utilise néanmoins l'estimateur suivant :

$$\overline{u_{l,i}}^{\text{LDA}} \equiv u_{l,i} = \widehat{u_{l,i}} \quad (8.18)$$

Pour la phase liquide, les fluctuations de vitesse décorrélée sont entièrement résolues (puisque'il n'y a pas de terme de sous maille pour cette contribution). Ainsi, de la même façon que pour la phase gazeuse, le terme de variance de sous-maille n'est pas reconstruit :

$$\overline{u'_{l,i}}^2{}^{\text{LDA}} \equiv \left(\widehat{\check{u}_{l,i}}^2 - \widehat{\check{u}_{l,i}}^2 \right) + \widehat{u''_{p,i}}^2 \quad (8.19)$$

L'utilisation des Eqs. (8.15), (8.18), (8.16) et (8.19) en omettant les termes de variance de sous-maille pourra engendrer un biais dans les comparaisons entre les résultats expérimentaux et les résultats des simulations aux grandes échelles présentées.

Chapitre 9

Carburant de la chambre MERCATO

Sommaire

9.1 Paramètres numériques	176
9.1.1 Géométrie	176
9.1.2 Maillage	177
9.1.3 Conditions aux limites	178
9.1.4 Temps caractéristiques	182
9.1.5 Stratégies numériques mises en oeuvre	184
9.1.6 Conditions initiales	186
9.2 Analyse de l'écoulement monophasique	186
9.2.1 Zones de recirculation	187
9.2.2 Observation cinématique de l'écoulement vrillé	190
9.2.3 Comparaison aux mesures expérimentales	192
9.3 Analyse de l'écoulement diphasique	199
9.3.1 Visualisations instantanées de la phase dispersée	199
9.3.2 Comparaison aux mesures expérimentales	201
9.3.3 Interaction spray et turbulence	206
9.3.4 Evaporation et distribution de carburant	210
9.3.5 Analyse fréquentielle de l'écoulement diphasique	212
9.3.6 Bilan de quantité de mouvement de la phase dispersée	222

Le banc MERCATO présenté au Chapitre 8 constitue un excellent cas de validation des méthodes numériques pour les écoulements diphasiques dispersés. Cette configuration conduit à un écoulement vrillé caractéristique des chambres de combustion aéronautique. La dynamique des phases gazeuse et liquide a été caractérisée par LDA-PDA et pourra être comparée aux résultats issus des simulations.

La première section de ce chapitre s'attache à détailler l'ensemble des paramètres numériques des simulations Euler-Euler présentées dans ce manuscrit. Un soin particulier

a été porté au maillage et aux paramètres influençant les niveaux de viscosité dans les différentes simulations réalisées. La deuxième section porte sur l'analyse de l'écoulement monophasique. Dans un premier temps, la structure générale de cet écoulement a été analysée, en identifiant notamment les zones de recirculation de l'écoulement gazeux qui auront une influence importante pour l'écoulement dispersé. Les composantes de vitesse moyenne et fluctuante sont comparées systématiquement aux mesures expérimentales et permettent de valider l'approche numérique pour la résolution de la phase porteuse. La dernière section de ce chapitre comporte une analyse détaillée de l'écoulement diphasique obtenu avec la simulation Euler-Euler *mésoscopique*. Les composantes de vitesse moyenne et fluctuante de la phase dispersée sont comparées systématiquement aux mesures LDA-PDA afin de valider la méthode et d'évaluer sa fiabilité. Une analyse détaillée a permis d'identifier des structures instationnaires dans la dynamique de l'écoulement diphasique. Ces structures ont été caractérisées en terme de fréquence et correspondent à une instabilité hydrodynamique. Enfin une analyse fine des variations de quantité de mouvement de la phase dispersée permet d'identifier les mécanismes prépondérants sur la dynamique des gouttes en différents points de l'écoulement.

9.1 Paramètres numériques

Cette première section résume les paramètres numériques et les choix de modélisation physique employés dans les différentes simulations présentées dans la partie . Le maillage de la configuration présentée à la Fig. 8.2 est identique pour toutes les simulations. Le carburant injecté est modélisé par le KERO.LUCHE présenté au Chapitre 6, l'injection est traitée en employant la méthodologie FIM-UR présentée au Chapitre 7. Les paramètres des différentes stratégies numériques mises en oeuvre, cf. Chapitre 5, sont donnés au §-9.1.5.

9.1.1 Géométrie

Le domaine de calcul prend en compte tous les éléments géométriques qui ont une influence sur l'écoulement aérodynamique ou acoustique de la chambre. Ainsi comme présenté Fig. 9.1 le domaine de calcul s'étend du tuyau d'amenée d'air en amont du plenum jusqu'à la sortie de la chambre. Pour l'accès et le nettoyage des hublots de visualisation, les expérimentateurs ont réalisés les séquences de mesure LDA-PDA en laissant déboucher la chambre à l'air libre. Ainsi afin de ne pas contraindre le développement de la zone centrale de recirculation comme l'expérience, il a été choisi de modéliser l'atmosphère par une boîte cubique dans laquelle circule un léger cocourant. Une vue globale du domaine de calcul est donnée Fig. 9.1. Le domaine complet fait alors 75 cm de long et 50 cm de large !

Afin de simplifier le maillage, les chanfreins dans les vrilles du tourbillonneur ont été supprimés. Pour appliquer les profils d'injection construits grâce à la méthodologie FIM-UR présentée au Chapitre 7, la surface d'injection a été élargie comme montré à la Fig. 7.10.

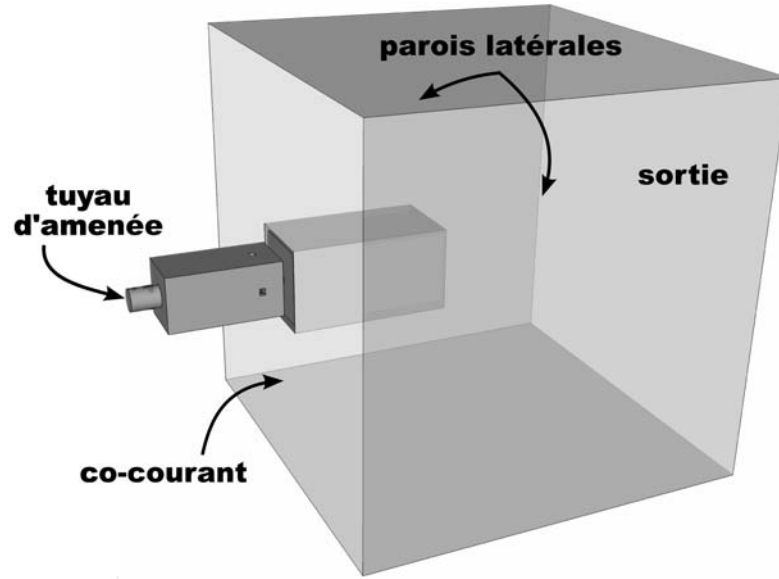


FIG. 9.1: Vue globale du domaine de calcul avec la boîte modélisant l'influence de l'atmosphère extérieure.

9.1.2 Maillage

Le domaine est entièrement maillé par des tétraèdres, ce qui permet de raffiner/dé-raffiner rapidement. Ainsi le maillage est très largement dé-raffiné dans la boîte modélisant l'atmosphère mais très fin dans la zone d'intérêt proche de l'injecteur. Par rapport au maillage utilisé par Lamarque (2007) dans ses travaux de thèse, celui-ci est un peu plus raffiné dans le canaux du tourbillonneur, dans le diffuseur et dans la zone proche injection et ce jusqu'au dernier plan de mesure à $z = 116$ mm du fond de chambre comme le montre la figure Fig. 9.2(b).

La grille obtenue contient près de 650 000 noeuds soit 3.5 millions de tétraèdres. Les caractéristiques du maillage sont données Tab. 9.1.

Nombre de cellules	3 527 637
Nombre de noeuds	649 282
Volume du maillage	0.42 m ³
Volume du plus petit élément	5.2×10^{-12} m ³
Pas de temps (CFL=0.7)	2.2×10^{-7} s

TAB. 9.1: Caractéristiques du maillage employé.

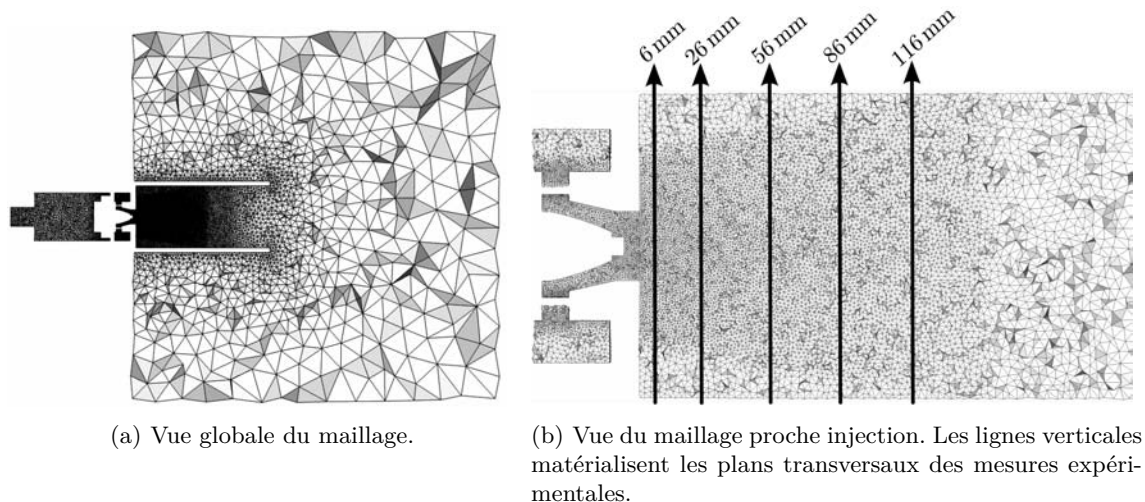


FIG. 9.2: Coupe longitudinale du maillage.

9.1.3 Conditions aux limites

Les conditions aux limites pour la phase gazeuse sont données Tab. 9.2. Les conditions aux limites pour la phase liquide sont données Tab. 9.3. Le liquide utilisé est du kérosène modélisé par l'espèce `KERO.LUCHE` définie à la section 6.3 et dont les paramètres physiques en phase liquide sont donnés §-6.3.3. Les profils d'injection sur l'entrée de liquide sont établis selon la méthodologie FIM-UR développée au Chapitre 7 : les profils obtenus avec les paramètres listés dans le Tab. 9.4 sont représentés sur la Fig. 9.3 pour les deux débits considérés dans les **Cas II** et **III**. Comme expliqué à la section 3.1.2 les variables de la phase liquide doivent être définies en tout point du domaine. Ainsi même sur les entrées purement gazeuses la fraction volumique de liquide est tout de même définie non nulle et du liquide dont la masse doit être négligeable est injecté. Cet aspect est vérifié au cours de la simulation. La vitesse du liquide est alors prise identique à celle du gaz.

Les paramètres utilisés pour décrire l'atomiseur pressurisé-swirlé *Delavan* (Tab. 9.4) ont été fournis par les expérimentateurs. Le diamètre moyen des gouttes sur la condition limite d'injection est choisi égal au diamètre moyen de l'ensemble des gouttes enregistrées par PDA à 6 mm du fond de chambre sur l'axe de la chambre pour les campagnes correspondant au **Cas II**. Le choix a été fait de conserver ce même diamètre d'injection pour les simulations correspondant au **Cas III**.

Les profils de fraction volumique, Fig. 9.3(a), et de densité de gouttes, Fig. 9.3(b), sont identiques pour les deux débits puisque l'ensemble des paramètres de l'injecteur et notamment les diamètres moyens, sont conservés dans les deux cas considérés. La vitesse

¹Le co-courant d'air dans la boîte modélisant l'atmosphère devrait être à température ambiante. Néanmoins le maillage étant très peu raffiné, par soucis de simplicité, le choix a été fait de prendre la même température que celle de l'air injecté. Cela évite d'avoir à résoudre une couche de mélange thermique dans l'atmosphère.

Nom	Type	Paramètres physiques	
<i>Tuyau d'amenée</i>	NSCBC	Température	$T_g = 463 \text{ K}$
		Débit massique	$m_a = 15.0 \text{ g/s}$
		Composition	air pur
<i>Co-courant</i>	NSCBC	Température	$T_g = 463 \text{ K}^1$
		Vitesse débitante	$U_{\text{bulk}} = 0.15 \text{ m/s}$
		Composition	air pur
<i>Atomiseur</i> Cas I	Paroi	Adhérente Adiabatique	
<i>Atomiseur</i> Cas II	NSCBC	Température	$T_g = 463 \text{ K}$
		Vitesse débitante	$U_{\text{bulk}} = 1.3 \times 10^{-3} \text{ m/s}$
		Composition	air pur
<i>Atomiseur</i> Cas III	NSCBC	Température	$T_g = 463 \text{ K}$
		Vitesse débitante	$U_{\text{bulk}} = 2.3 \times 10^{-3} \text{ m/s}$
		Composition	air pur
<i>Parois : plenum</i> <i>tourbillonneur</i> <i>chambre</i>	Paroi	Adhérente Adiabatique	
<i>Parois latérales</i> <i>atmosphère</i>	Paroi	Non-Adhérente Adiabatique	
<i>Sortie</i>	NSCBC	Pression	$P = 1 \text{ atm}$

TAB. 9.2: Conditions aux limites pour la phase gazeuse.

axiale débitante du liquide, Fig. 9.3(d), augmente avec le débit, comme celle de l'air entraîné par le spray (Fig. 9.3(c)). La vitesse tangentielle sur le plan de sortie de l'atomiseur est également proportionnelle au débit liquide (Eq. (7.6)). Ainsi en augmentant le débit liquide, les vitesses radiale et orthoradiale sur la condition limite du calcul ont une pente plus importante, Figs. 9.3(e) et 9.3(f).

Nom	Type	Paramètres physiques	
<i>Tuyau d'amenée</i>	Dirichlet	Température	$T_l = 300 \text{ K}$
		Fraction volumique	$\alpha_l = 7.1 \times 10^{-9}$
		Densité de gouttes	$n_l = 5 \times 10^8$
		Vitesse débitante	$U_{l,\text{bulk}} = 22 \text{ m/s}$
<i>Co-Courant</i>	Dirichlet	Température	$T_l = 300 \text{ K}$
		Fraction volumique	$\alpha_l = 7.1 \times 10^{-9}$
		Densité de gouttes	$n_l = 5 \times 10^8$
		Vitesse débitante	$U_{l,\text{bulk}} = 0.15 \text{ m/s}$
<i>Atomiseur</i> Cas I	Paroi	Non-Adhérente	
<i>Atomiseur</i> Cas II	Injection	Température	$T_l = 300 \text{ K}$
	Dirichlet	Débit liquide	$m_l = 1 \text{ g/s}$
		Diamètre de gouttes	$d = 55 \text{ }\mu\text{m}$
<i>Atomiseur</i> Cas III	Injection	Température	$T_l = 300 \text{ K}$
	Dirichlet	Débit liquide	$m_l = 2 \text{ g/s}$
		Diamètre de gouttes	$d = 55 \text{ }\mu\text{m}$
<i>Parois : plenum, tourbillonneur, chambre, atmosphère</i>	Paroi	Non-Adhérente	
<i>Paroi fond de chambre</i>	Paroi	Adhérente	
<i>Sortie</i>	Dirichlet		

TAB. 9.3: Conditions aux limites pour la phase liquide.

Rayon de décharge	$R_0 = 0.25 \text{ mm}$
Demi-angle de spray	$\theta_S = 40^\circ$
Pression d'injection	$\Delta P_i = 6.89 \times 10^5 \text{ Pa}$
Débit de calibration	$m_l^c = 3.3 \text{ g/s}$
Rayon de la surface d'injection	$R_i = 4 \text{ mm}$
Diamètre moyen des gouttes	$d_{10} = 55 \text{ }\mu\text{m}$
Sens de rotation	sens horaire

TAB. 9.4: Paramètres décrivant l'atomiseur liquide.

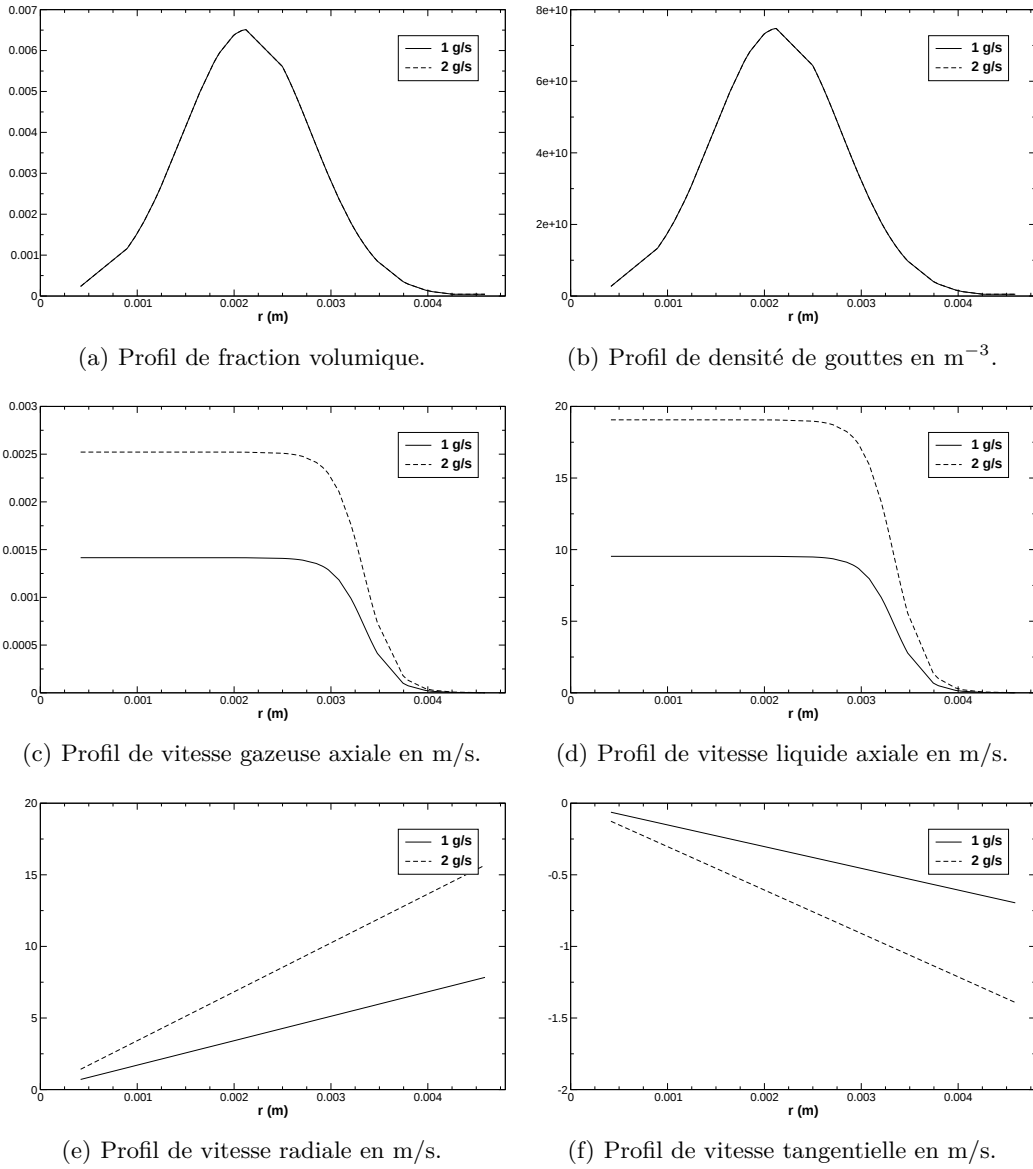


FIG. 9.3: Profils obtenus pour chaque débit en suivant la méthodologie FIM-UR présentée au Chapitre 7 et résumée à la Fig. 7.7. Les paramètres d'entrée sont donnés au Tab. 9.4.

9.1.4 Temps caractéristiques

Il est intéressant de caractériser une configuration par les temps caractéristiques qui pilotent les différents phénomènes physiques qui coexistent. Dans le cas présent, on peut définir :

- *Le temps convectif* τ_{conv}

Il correspond au temps nécessaire pour renouveler intégralement l'air contenu dans le domaine de calcul. Une estimation de ce temps peut être donnée en calculant le temps nécessaire pour que le fluide traverse de part en part le domaine à vitesse constante u_{bulk} en négligeant le mouvement de giration. La vitesse moyenne u_{bulk} est définie comme la vitesse débitante à l'entrée de la chambre de combustion, c'est-à-dire sur le disque de sortie du diffuseur représenté Fig. 9.4.

$$m_{\text{air}} = \rho_g u_{\text{bulk}} S_{\text{diffuseur}} \quad (9.1)$$

Pour le point de fonctionnement étudié on trouve $u_{\text{bulk}} = 28$ m/s. Le domaine de l'entrée du plenum jusqu'à la sortie de la chambre a une longueur de $L_D = 54.8$ cm. Ainsi on obtient :

$$\tau_{\text{conv}} = \frac{L_D}{u_{\text{bulk}}} = 20 \text{ ms} \quad (9.2)$$

- *Le temps de swirl* τ_{swirl}

Il correspond au temps nécessaire pour que le fluide injecté dans la chambre de combustion réalise une rotation complète autour de l'axe de la chambre, en négligeant son expansion radiale.

$$\tau_{\text{swirl}} = \frac{2\pi}{\omega} \quad (9.3)$$

avec ω la vitesse de rotation du fluide sur le plan de sortie du diffuseur représenté Fig. 9.4. Cette vitesse est calculée *a posteriori* sur un champ moyen obtenu après 400 ms de temps physique simulé pour l'écoulement monophasique **Cas I**¹. On mesure $\omega = 636$ rad/s. Le temps de swirl correspondant vaut :

$$\tau_{\text{swirl}} = 9.5 \text{ ms} \quad (9.4)$$

- *Le temps de relaxation des gouttes* τ_p

Il correspond au temps nécessaire pour que la vitesse d'une goutte s'équilibre avec la vitesse du fluide porteur via la force de traînée. Ce temps s'écrit, sans tenir compte de la correction de Schiller & Nauman (1935), selon :

$$\tau_p = \frac{\rho_l d^2}{18 \mu} \quad (9.5)$$

¹Il s'agit du champ moyen du calcul présenté à la section suivante 9.2

Pour les tailles de gouttes considérées dans le calcul, allant de $55\ \mu\text{m}$ (diamètre à l'injection) à $2\ \mu\text{m}$ (diamètre de clipping), le temps de relaxation varie dans la fourchette :

$$\tau_p \quad [0.7, 5.1] \quad \text{ms} \quad (9.6)$$

Le nombre de Stokes construit sur ce temps de relaxation et un temps caractéristique de la dynamique de la phase porteuse permet d'identifier le comportement des particules, plutôt inertiel ou plutôt traceur. On peut calculer deux nombres de Stokes, l'un basé sur le temps convectif, l'autre sur le temps de swirl du fluide porteur :

$$St_{\text{conv}} \quad [3 \times 10^{-4}, 0.25] \quad (9.7)$$

$$St_{\text{swirl}} \quad [6 \times 10^{-4}, 0.5] \quad (9.8)$$

Les gouttes injectées de diamètre $55\ \mu\text{m}$ ont un nombre de Stokes proche de l'unité. Elles vont interagir fortement avec les grandes structures et le mouvement de giration de l'écoulement gazeux, et seront peu sensibles aux petites structures. Au fur et à mesure de leur évaporation, elles vont commencer à devenir sensibles aux petites structures turbulentes.

- *Le temps d'évaporation*

L'étude réalisée à la section 6.3 a permis de caractériser deux temps pour le phénomène d'évaporation. Le temps de préchauffage τ_{ch} correspond au temps nécessaire pour qu'une goutte initialement froide atteigne la température humide ou *wet-bulb*. Le temps d'évaporation τ_{evap} correspond au temps nécessaire pour qu'une goutte s'évapore complètement. Avec la modélisation retenue dans AVBP pour la modélisation de l'évaporation du kérosène, les temps caractéristiques de l'évaporation d'une goutte immobile dans une atmosphère au repos sont :

$$\tau_{\text{ch}} = 15 \text{ ms} \quad (9.9)$$

$$\tau_{\text{evap}} = 42 \text{ ms} \quad (9.10)$$

On peut alors classer les différents temps physiques par ordre décroissant :

$$\tau_{\text{evap}} > \tau_{\text{conv}}, \tau_{\text{ch}}, \tau_{\text{swirl}} > \tau_p \quad (9.11)$$

Le temps de vie des gouttes est plus grand que les temps caractéristiques du fluide porteur. Ainsi la phase dispersée pourra exister sur une grande partie de la chambre de combustion et pourra interagir avec les grandes structures de l'écoulement gazeux.

Le nombre de Reynolds de l'écoulement gazeux basé sur le diamètre du diffuseur vaut environ 25 000. Pour ces valeurs de nombre de Reynolds, une zone inertielle est présente dans les spectres d'énergie turbulente (Pope, 2000), justifiant l'utilisation d'une approche LES pour ce type d'écoulement.

$$Re = \frac{\rho_g u_{\text{bulk}} D}{\mu} = 25\,000 \quad (9.12)$$

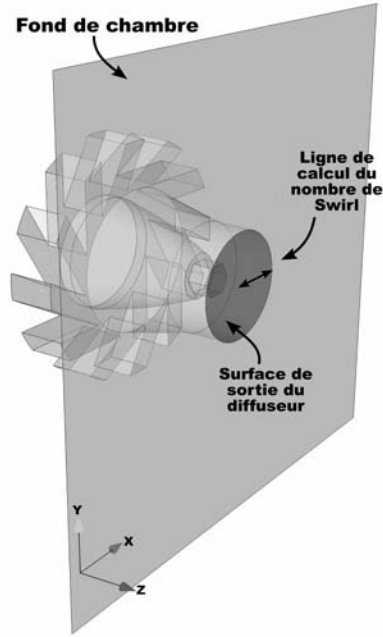


FIG. 9.4: Visualisation du plan de sortie du diffuseur de rayon $R = 15 \text{ mm}$, et matérialisation de la ligne de calcul du nombre de Swirl.

9.1.5 Stratégies numériques mises en oeuvre

Un travail amont (non présenté dans ces travaux) sur l'influence des modèles physiques et numériques pour la phase gazeuse a conduit à choisir les paramètres de calcul présentés Tab. 9.5. Le schéma de convection employé est le schéma TTGC, troisième ordre en temps et en espace. Le modèle de sous-maille est le modèle de WALE capable de bien résoudre l'effet des petites échelles dans un écoulement cisailé libre. Les parois sont adhérentes et aucun modèle pour prendre en compte la couche limite n'est employé, dans la mesure où la zone proche paroi n'est pas au centre de l'étude. Enfin les coefficients de viscosités ont été optimisés c'est-à-dire fixés à la valeur minimale permettant un calcul stable. Ces paramètres sont gardés identiques pour l'ensemble des calculs présentés dans cette thèse, sauf pour le calcul réalisé avec le schéma PSI qui ne peut être utilisé qu'avec le schéma Lax-Wendroff pour la phase gazeuse. Les paramètres utilisés pour la phase gazeuse pour ce cas sont donnés Tab. 9.6. Le paramètre $\epsilon^{(2)}$ est augmenté par rapport au schéma TTGC pour palier les effets dispersifs du schéma LW.

Pour le **Cas II**, plusieurs stratégies numériques sont mises en place pour la phase dispersée. L'ensemble des cas réalisés est donné Tab. 9.7, la nomenclature permettra d'identifier les cas tests plus facilement par la suite.

²Dans ce calcul, aucun traitement de type loi de paroi n'est utilisé. Cela ne signifie pas pour autant que les couches limites sont résolues.

³La nomenclature des stratégies numériques liquides est donnée au Tab. 5.1.

Modèle de sous-maille	modèle WALE
Traitement des parois	parois adhérentes ²
Schéma numérique	TTGC
Viscosité artificielle	senseur de Colin $\epsilon^{(2)} = 0.02, \epsilon^{(4)} = 0.01$

TAB. 9.5: *Modèles physiques et paramètres numériques pour la phase gazeuse.*

Modèle de sous-maille	modèle WALE
Traitement des parois	parois adhérentes
Schéma numérique	LW
Viscosité artificielle	senseur de Colin $\epsilon^{(2)} = 0.05, \epsilon^{(4)} = 0.01$

TAB. 9.6: *Modèles physiques et paramètres numériques pour la phase gazeuse pour le calcul réalisé avec le schéma PSI.*

	Nomenclature	Schéma gaz	Stratégie liquide ³
Cas I	TTGC_GAS	TTGC	—
Cas II	TTGC_CMS_noRUE_1	TTGC	TTGC_AV_3
	TTGC_CMS_RUE_1	TTGC	TTGC_RUE_AV_4
	LW_PSI_noRUE_1	LW	PSI_AV_3
Cas III	TTGC_CMS_RUE_2	TTGC	TTGC_RUE_AV_4

TAB. 9.7: *Résumé des simulations présentées dans cette thèse.*

Lorsque le mouvement décorrélé, noté RUM, n'est pas résolu, le senseur CMS est utilisé avec les paramètres utilisateurs : $\epsilon^{(2)} = 0.25$ et $\epsilon^{(4)} = 0.05$. Lorsque l'équation de l'énergie décorrélée est résolue, le senseur CMS-lite est utilisé avec les paramètres utilisateurs $\epsilon^{(2)} = 0.30$ et $\epsilon^{(4)} = 0.001$. Lorsque le schéma PSI est employé et malgré sa robustesse, il est nécessaire d'employer un minimum de viscosité artificielle. Le senseur CMS est utilisé avec les paramètres utilisateurs $\epsilon^{(2)} = 0.04$ et $\epsilon^{(4)} = 0.004$. Ces paramètres utilisateurs sont fixés de manière itérative pour qu'ils soient suffisants pour que le calcul se déroule sans rencontrer de problème numérique mais les plus faibles possibles. Ils sont rappelés dans le tableau suivant.

Le calcul de l'énergie décorrélée doit être accompagné d'une limitation des valeurs minimale et maximale. Comme l'a montré Riber (2007) dans ses travaux de thèse, l'effet dispersif du schéma TTGC entraîne l'apparition sur le domaine de calcul de valeurs non physique, en particulier négatives. D'autre part, Riber (2007) a souligné que la viscosité RUM, prépondérante dans les zones de forts gradients, détruit une partie des fluctuations. Pour minimiser ces effets, Martinez (2009) a eu l'idée de limiter la valeurs maximale de l'énergie décorrélée à un certain pourcentage de l'énergie cinétique *mésoscopique* résolue. Dans

Stratégie Liquide	Senseur de VA	$\epsilon^{(2)}$	$\epsilon^{(4)}$
TTGC_AV_3	CMS	0.25	0.05
TTGC_RUE_AV_4	CMS-lite	0.30	0.001
PSI_AV_3	CMS	0.04	0.004

TAB. 9.8: Paramètres numériques pour la phase dispersée en fonction de la stratégie numérique retenue.

les calculs TTGC_CMS_RUE.1 et TTGC_CMS_RUE.2, l'énergie décorrélée est limitée à des valeurs positives inférieures à 20% de l'énergie cinétique mésoscopique résolue. Pour les calculs diphasiques utilisant le schéma TTGC, il est nécessaire de couper les valeurs négatives de fraction volumique de liquide et de densité volumique de gouttes. Les valeurs minimales sont choisies suffisamment faibles pour ne pas influencer le bilan de masse dans le domaine de calcul et sont données à l'Eq. (9.13). Les gouttes s'évaporent ainsi jusqu'à un diamètre de $2 \mu\text{m}$.

$$\alpha_{l,\text{clip}} = 4.2 \times 10^{-12} \quad n_{l,\text{clip}} = 1 \times 10^6 \text{ m}^{-3} \quad = \quad d_{\text{clip}} = 2 \mu\text{m} \quad (9.13)$$

9.1.6 Conditions initiales

La solution initiale du calcul monophasique correspond à l'interpolation sur le maillage présenté Fig. 9.2 d'une solution instantanée du calcul convergé de Lamarque (2007). Le calcul a été tourné pendant plusieurs temps convectifs (Eq. (9.2)) afin d'équilibrer l'énergie et les flux entrée/sortie.

Une solution instantanée du calcul monophasique établi sert pour l'initialisation des calculs diphasiques. Un champ de gouttes de petite taille ($3 \mu\text{m}$) et en très petit nombre, à une température figée à $T_l = 300 \text{ K}$, est initialisé sur tout le domaine. Les valeurs initiales sont données Eq. (9.14). Le calcul diphasique sans injection est alors tourné 14 ms. Ensuite l'injection de carburant est mise en route, le calcul est tourné jusqu'à ce que le débit atteigne sa valeur cible. Le calcul est encore tourné jusqu'à atteindre un équilibre entre l'apport de liquide par injection et la perte de masse par évaporation. La variation de masse totale du liquide dans le domaine oscille alors autour de 0. Le régime est alors considéré comme "établi" pour la phase liquide. Les statistiques sont alors enregistrées sur environ 200 ms pour chaque simulation.

$$\alpha_l^0 = 1.4 \times 10^{-9} \quad n_l^0 = 5 \times 10^8 \text{ m}^{-3} \quad T_l^0 = 300 \text{ K} \quad (9.14)$$

9.2 Analyse de l'écoulement monophasique

Les visualisations bi-dimensionnelles sont faites soit dans le plan médian longitudinal de la chambre, soit dans une coupe transversale de la chambre. Les plans de coupes sont matérialisés Fig. 9.5.

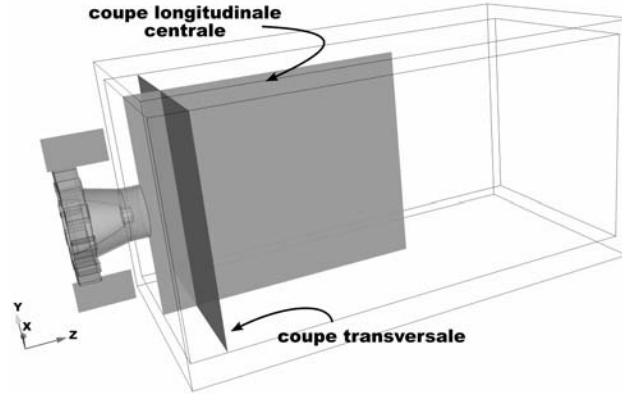


FIG. 9.5: Définition des plans de coupes longitudinale et transversale pour la présentation des résultats.

9.2.1 Zones de recirculation

Les écoulements vrillés dans les chambres de combustion sont largement décrits et détaillés dans la littérature (Syred, 2006; Lucca-Negro & O'Doherty, 2001). Ces écoulements sont très utilisés pour stabiliser la combustion dans le foyer, en raison des grandes zones de recirculation caractéristiques qui sont formées dans ce type d'écoulement. Les zones de recirculation dans la chambre MERCATO sont matérialisées par une iso-surface de vitesse axiale nulle Fig. 9.6.

Dans la chambre MERCATO, le nombre de swirl est suffisamment élevé pour que se forme au centre de la chambre une zone centrale de recirculation. Le mécanisme de formation de cette zone de recirculation est lié à l'apparition d'un gradient de pression adverse, décrit dans la revue de Syred (2006). Le mouvement de giration crée naturellement un gradient de pression radial. Lorsque l'écoulement passe du diffuseur dans la chambre, l'expansion brutale de la section conduit l'amplitude de l'écoulement tangentiel, et donc du gradient de pression radial, à s'affaiblir avec la distance axiale (Fig. 9.7). Le champ moyen de vitesse tangentielle est présenté sur la coupe médiane longitudinale Fig. 9.8. Le mécanisme décrit, lié à l'expansion brusque et à la giration, est connu sous le nom de *vortex breakdown* (Lucca-Negro & O'Doherty, 2001). Il est responsable de l'apparition du gradient de pression adverse près de l'axe, qui conduit l'écoulement au centre à s'inverser et à recirculer. Dans la configuration étudiée, la zone de recirculation centrale s'étend hors de la chambre de combustion (Fig. 9.6). Son expansion dans la boîte modélisant l'atmosphère est limitée par le faible raffinement du maillage. Ainsi la recirculation s'interrompt avant la sortie du domaine ce qui permet d'éviter des problèmes numériques sur la condition limite de sortie. Près de l'injecteur la zone est étroite, lorsque la vitesse de rotation s'affaiblit Fig. 9.8, et que le gradient de pression radial disparaît, la zone de recirculation centrale s'élargit brusquement.

Le champ de pression moyen donné à la Fig. 9.7 montre que la perte de charge a essentiellement lieu dans le système d'injection.

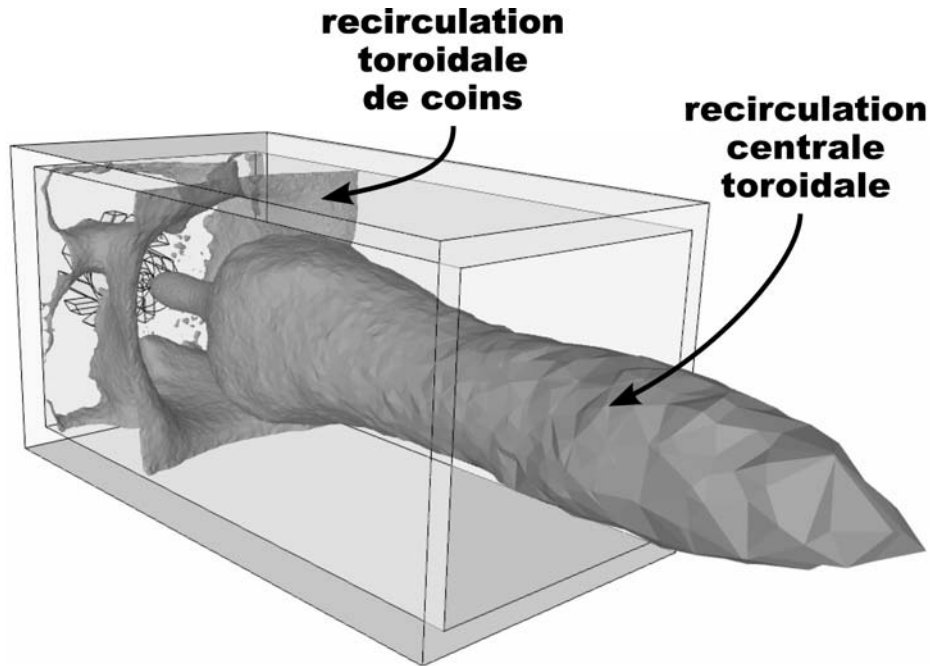


FIG. 9.6: Visualisation des zones de recirculation par une iso-surface de vitesse axiale moyenne nulle.

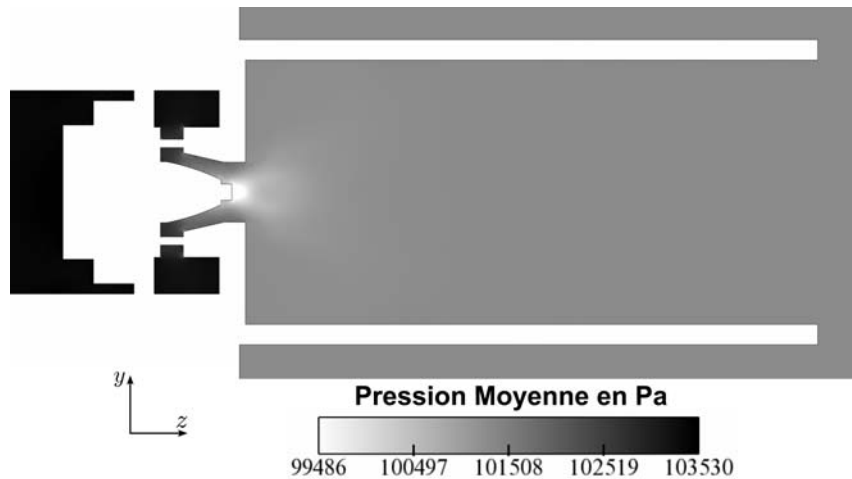
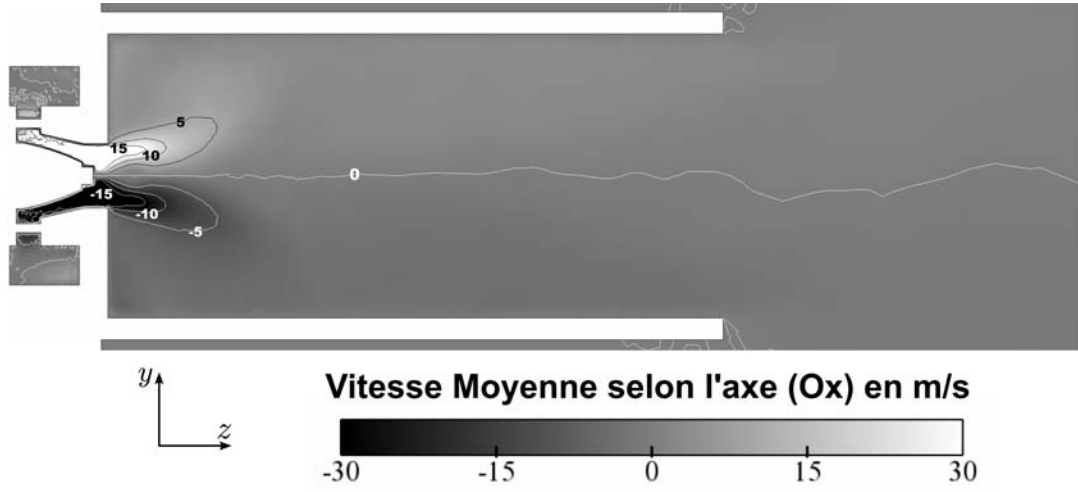


FIG. 9.7: Champ de pression moyen dans le plan médian longitudinal.

Enfin une zone de recirculation de coins est visible Fig. 9.6. Cette zone occupe près d'un tiers de la longueur de la chambre de combustion. Sa fore n'est pas parfaitement à symétrie de révolution et l'on distingue des effets de forme dus à la section carrée de la chambre. Pour s'en convaincre, deux coupes transversales prises à deux distances différentes du fond de chambre sont présentées Fig. 9.9. Proche du fond de chambre, on distingue 4 poches de recirculation distinctes et une forme en croix. Plus loin, ces 4 poches se rassemblent en une seule.

FIG. 9.8: *Champ de vitesse moyenne orthogonale au plan médian longitudinal.*

Cette structure en forme de croix a été également observée expérimentalement. Les gouttes de kérosène piégées dans les zones de recirculation impactent la paroi et diluent la peinture. Après plusieurs séquences de mesure le fond de chambre initialement peint en noir est pris en photo Fig. 9.10. La peinture a été diluée par le kérosène liquide aux 4 coins de la chambre, tandis qu'il reste une croix sombre de peinture. On retrouve Fig. 9.10 une forme identique aux zones de recirculation matérialisées Fig. 9.9 à 20 mm du fond de chambre.

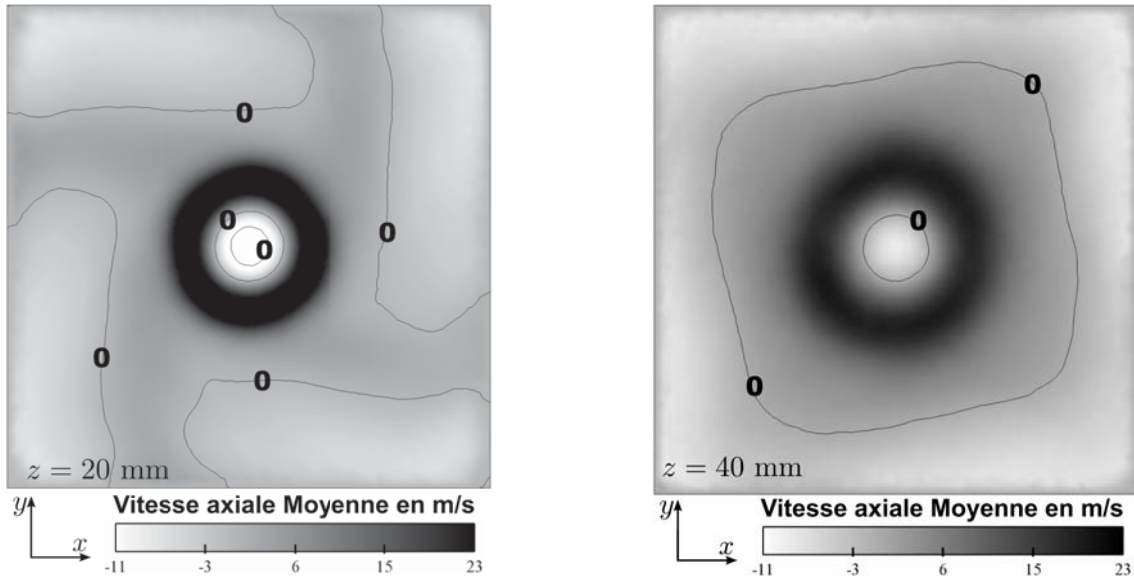
FIG. 9.9: *Coupes transversales de vitesse axiale moyenne. Les iso-contours de vitesse axiale nulle matérialisent les zones de recirculations.*



FIG. 9.10: Photographie du fond de chambre prise par R. Lecourt à la suite de plusieurs séquences de mesure. La peinture a été diluée dans les coins par les gouttes de kérosène liquide piégées dans les zones de recirculation.

9.2.2 Observation cinématique de l'écoulement vrillé

Le champ de vitesse axiale moyenne dans le plan médian est présenté Fig. 9.11. Les zones de recirculation créent un blocage de l'écoulement. Ainsi le fluide est fortement accéléré lorsqu'il passe l'élargissement brusque du diffuseur vers la chambre de combustion. Les fortes vitesses axiales diminuent ensuite très rapidement avec la distance axiale. La vitesse moyenne tangentielle (Fig. 9.8) suit le même schéma d'évolution l'élargissement brusque de la section de passage conduisant rapidement la vitesse tangentielle à diminuer.

Autour de la zone de recirculation, le fluide subit un très fort cisaillement du aux fortes vitesses opposées. C'est dans cette zone que vient osciller le *Precessing Vortex Core*. Il s'agit d'un tourbillon très énergétique qui apparaît dans les écoulements vrillés lorsque le nombre de Swirl dépasse la valeur critique de 0.6. Comme cela est décrit dans la revue de Lucca-Negro & O'Doherty (2001), ce tourbillon suit un mouvement de précession autour de la zone de recirculation. Ce phénomène est mis en évidence Fig. 9.12 sur deux champ instantanés. La structure tourbillonnaire est identifiée à l'aide du critère Q , basée sur le second invariant du tenseur de déformation construit à partir du taux de déformation $\mathbf{S}$ (Eq. (2.46)) et du taux de rotation :

$$Q = \frac{1}{2} \left(\omega^2 - \|\mathbf{S}\|^2 \right) \quad (9.15)$$

$$\text{avec : } \tilde{\Omega}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) \quad (9.16)$$

Une structure tourbillonnaire est repérée par une valeur de Q positive qui signifie que le taux de rotation est supérieur au taux de déformation. Selon Lucca-Negro & O'Doherty (2001) le PVC façonne la forme de la zone de recirculation centrale et pourrait expliquer la forme fine, proche injection, de la zone de recirculation.

Sur le plan de sortie du diffuseur montré Fig. 9.4, le nombre de Swirl est calculé comme

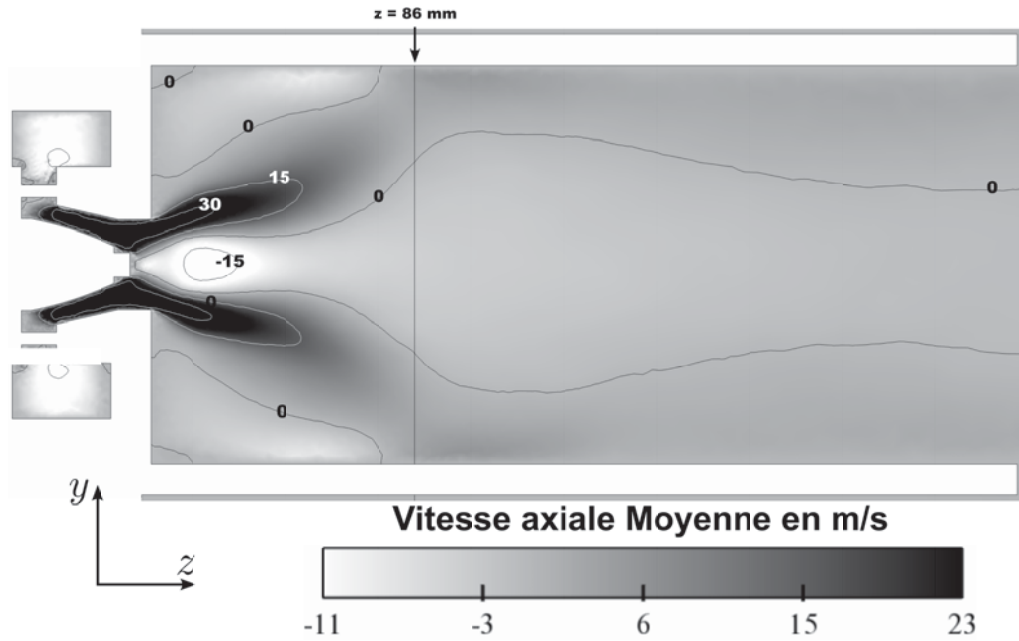


FIG. 9.11: **Cas I** - Champ de vitesse axiale moyenne. Les lignes noires et blanches matérialisent des iso-contour de vitesse dont la valeur est donnée sur le contour.

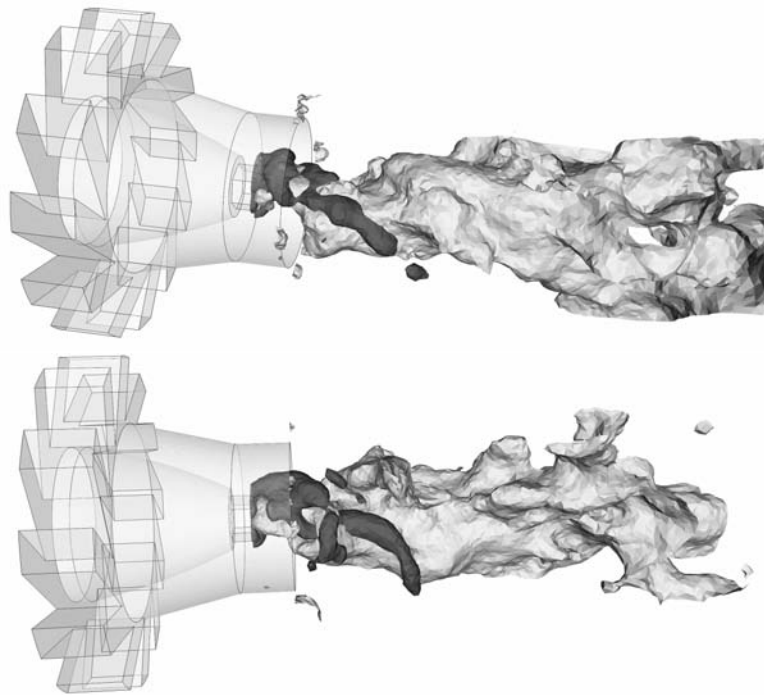


FIG. 9.12: Le PVC est matérialisé par une iso-surface de critère Q colorée en gris foncé calculé sur deux champs instantané de vitesse. La zone de recirculation centrale est matérialisée par une iso-surface de vitesse axiale nulle. Deux champs instantannés sont montrés.

le rapport du flux axial de moment angulaire sur le flux axial de moment axial, selon l'expression Eq. (9.17). La valeur obtenue, $S = 0.75$, est effectivement au-dessus du nombre de Swirl critique de 0.6, ce qui justifie la présence du PVC.

$$S = \frac{\int_0^R \rho u_z u_\theta r^2 dr}{R \int_0^R \rho u_z^2 r dr} \quad (9.17)$$

9.2.3 Comparaison aux mesures expérimentales

Perte de charge à l'injecteur

La perte de charge dans le système d'injection est mesurée sur le champ de pression moyenne Fig. 9.7, par différence entre la pression atmosphérique et la pression en amont du système d'injection calculée comme la moyenne sur un plan transverse dans le plenum. On obtient une perte de charge $\Delta P = 2018$ Pa. A partir de la section de passage minimale dans l'injecteur, on peut calculer le coefficient de perte de charge :

$$C_d = \frac{m_{air}}{S_{min} \sqrt{2\rho\Delta P}} \quad (9.18)$$

avec S_{min} la surface de passage minimale qui correspond à la section d'entrée des 12 vrilles de 6×11.3 mm² et $\rho = 0.78$ kg/m³. On calcule alors (Eq. (9.18)) un coefficient de perte de charge C_d de 0.32 dans la simulation.

Les expérimentateurs ont mesuré la pression relative entre la chambre et le plenum pour un ensemble de points de fonctionnement caractérisés par leur débit réduit W_R (Eq. (8.1)). Par interpolation entre les points expérimentaux donnés Fig. 9.13, on obtient pour le débit réduit $W_R = 0.32$ une perte de charge $\Delta P_{exp.} = 1581$ Pa, ce qui conduit à un coefficient de perte de charge $C_{d,exp.}$ de 0.30. Le coefficient de perte de charge mesuré par le calcul est assez proche du coefficient mesuré expérimentalement.

Vitesse moyenne

Les profils présentés dans cette section correspondent aux profils obtenus en moyennant les champs instantanés sur un temps de 780 ms, ce qui correspond à plus de 30 temps convectif, τ_{conv} (Eq. (9.2)). Ce long temps de simulation est nécessaire pour converger les statistiques dans les zones de recirculation dans lesquelles les temps convectifs sont très longs. Les moyennes effectuées sur des temps de simulation plus courts montraient en effet des asymétries importantes sur les profils de vitesses.

Dans l'ensemble, les profils des différentes composantes de vitesse sont en très bon accord avec les mesures expérimentales, que ce soit pour la composante de vitesse axiale Fig. 9.14 ou pour les composantes de vitesses radiale Fig. 9.15 et orthoradiale Fig. 9.16. Il existe néanmoins quelques différences notables, principalement sur les profils les plus en aval du fond de chambre, qui appellent quelques commentaires.

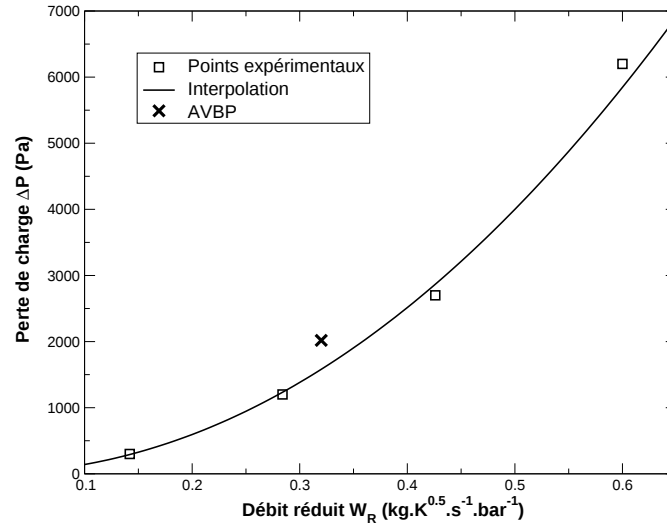


FIG. 9.13: Perte de charge mesurée (Linassier & Lecourt, 2009) et calculée sur le banc Mercato.

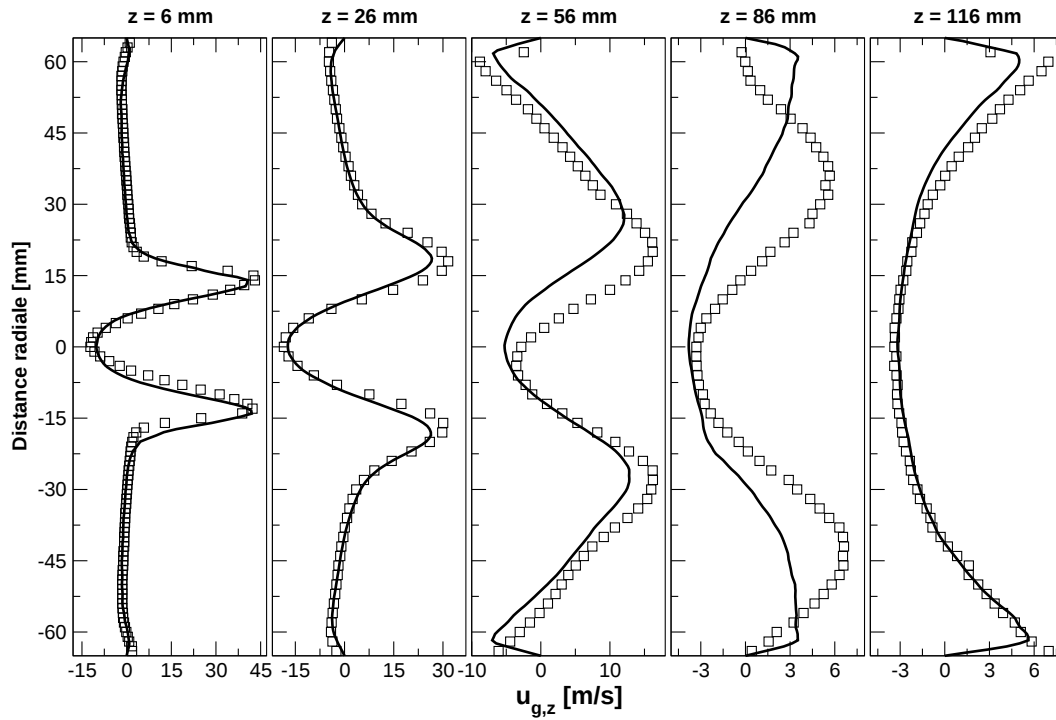


FIG. 9.14: **Cas I** - Profils de vitesse moyenne axiale en m/s. Symboles : LDA ; ligne pleine : TTGC_GAZ.

Sur les profils de vitesse axiale moyenne les premières différences importantes apparaissent dès 56 mm du fond de chambre. Sur cette traversée, la différence provient essentiellement d'un décalage de l'axe de rotation de l'écoulement dans les simulations et dans les expériences. On observe sur les profils expérimentaux que le minimum de vitesse n'est pas centré sur la position $r = 0$ mm et que la position des *extrema* n'est pas centré de part

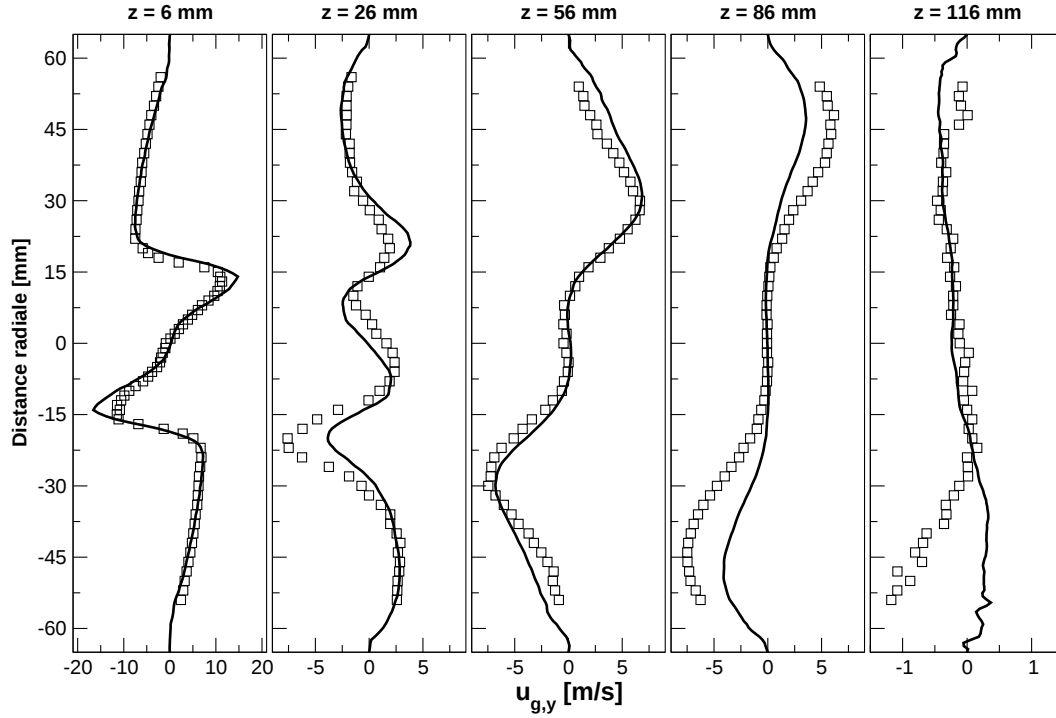


FIG. 9.15: **Cas I** - Profils de vitesse moyenne radiale en m/s. Symboles : LDA ; ligne pleine : TTGC_GAZ.

et d'autre de l'axe des origines. En revanche, dans la simulation on obtient une symétrie de rotation parfaite. Moyennant cette translation, les *maxima* sont relativement bien captés par la simulation LES mais leurs positions sont légèrement décalées vers l'extérieur. Le profil de vitesse axiale à 86 mm diffère très largement du profil expérimental. Dans la simulation, les maxima de vitesse ont quasiment atteint les parois latérales de la chambre, le cône est complètement ouvert. En revanche dans l'expérience les maxima de vitesse sont encore largement présents sur le profil. Étonnamment le profil à 116 mm retrouve les mesures expérimentales.

Les profils de vitesse tangentielle de la simulation sont bien symétriques par rapport à l'axe de rotation alors que les profils expérimentaux montrent quelques dissymétries à 26 et 116 mm du fond de chambre. À 86 mm, comme pour la composante axiale, les maxima de vitesse tangentielle sont sous-estimés par la simulation. Les profils de vitesse radiale sont également plus aplatis que les mesures LDA à 56 et 86 mm du fond de chambre.

Le désaccord important entre l'expérience et la simulation à $z = 86$ mm peut avoir plusieurs causes qui ont été étudiées :

- L'influence du maillage

Plusieurs maillages plus ou moins raffinés ont été évalués depuis les travaux de thèse de Lamarque (2007) et leur influence sur les profils à $z = 86$ mm est très faible. Le déraffinement du maillage débute très légèrement vers $z = 90$ mm, cf. Fig 9.2(b), afin

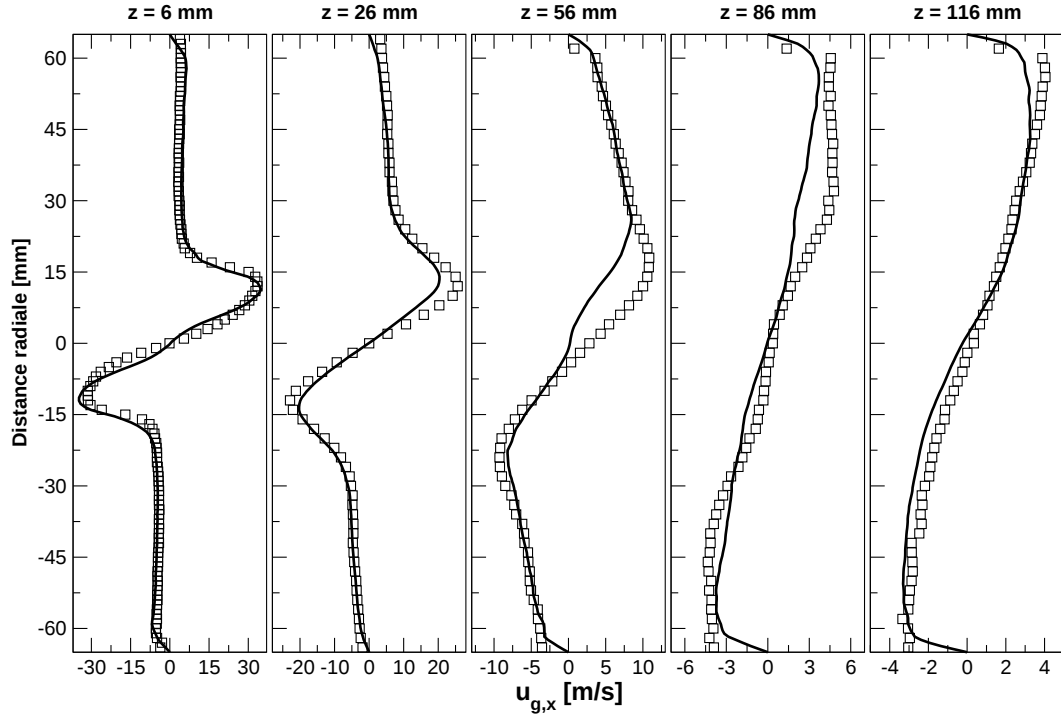


FIG. 9.16: **Cas I** - Profils de vitesse moyenne ortho-radiale en m/s. Symboles : LDA ; ligne pleine : TTGC_GAZ.

de limiter l'augmentation trop brusque de la diffusion numérique et de sous-maille. La taille des cellules augmente plus largement à partir de $z = 130$ mm pour assurer un nombre raisonnable de cellules sur le domaine. Le profil à $z = 86$ mm est dans une zone encore bien raffinée.

- L'influence du modèle de sous-maille
Les modèles Smagorinsky et WALE ont été évalués depuis les travaux de thèse de Lamarque (2007) et les meilleurs résultats ont été obtenus avec le modèle WALE retenu dans les simulations présentées dans ce manuscrit. Un champ instantané de viscosité turbulente adimensionnée par la viscosité laminaire est donné Fig. 9.17. Le ratio μ_{sgs}/μ est très important, entre 10 et 30, dans toute la zone de *vortex breakdown* démontrant que le modèle de sous-maille est effectivement très actif.
- La modélisation des parois
La mauvaise modélisation des parois (par des parois adhérentes et des couches limites sous-résolues) génère un fort cisaillement qui augmente artificiellement le niveau de turbulence et la dissipation turbulente, autrement dit le modèle de sous-maille “travaillerait” trop en proche paroi et pourrait influencer les interactions entre l'écoulement et le confinement des parois.
- Mauvais positionnement de l'ouverture du jet
La position du profil $z = 86$ mm est représentée par une flèche sur le champ de vitesse

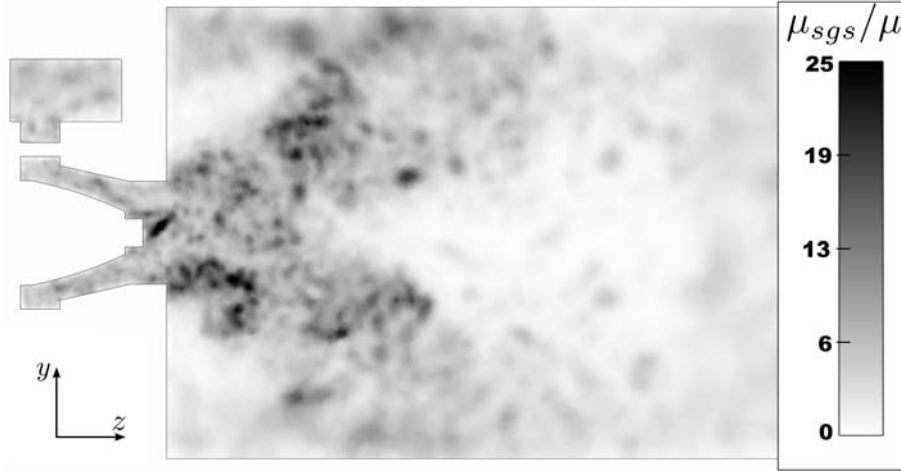


FIG. 9.17: Visualisation du champ de viscosité turbulente adimensionnée par la viscosité laminaire issu d'une solution instantanée de la simulation TTGC_GAZ.

axiale Fig. 9.11. On constate que ce profil est positionné précisément au niveau de l'ouverture brusque de la zone de recirculation centrale matérialisée par l'iso-contour de vitesse axiale nulle. Cette ouverture matérialise une bifurcation de l'écoulement amont qui ne "voit" pas la paroi à un écoulement qui perçoit l'effet du confinement des parois de la chambre de combustion. Ce mécanisme physique de recollement du jet d'air à la paroi est un mécanisme complexe d'interaction de la turbulence du jet libre avec la turbulence proche paroi. Il s'agit d'un phénomène très délicat à capturer précisément et qui fait intervenir simultanément les différents points évoqués ci-dessous : la discrétisation locale, le modèle de turbulence de sous-maille, la dissipation numérique et la résolution de l'écoulement pariétal. Sur la Fig. 9.18, les profils légèrement en amont de l'abscisse $z = 86$ mm sont comparés au profil expérimental obtenu à cette abscisse. On constate que l'ouverture de la zone de recirculation centrale est en fait prédite quelques 5 mm en amont par rapport à l'expérience.

Fluctuations de vitesse

Les profils d'écart-type de vitesse axiale, tangentielle et radiale sont présentés sur les Figs. 9.19, 9.20 et 9.21. Ces moments d'ordre 2 issus des résultats de la simulation TTGC_GAZ sont également en bon accord avec les mesures LDA, la forme générale et les détails des profils sont très bien captés. L'agitation est cependant de plus en plus sous-estimée à mesure que l'on s'éloigne du fond de chambre. En effet le maillage est progressivement déraffiné de sorte que la contribution de l'agitation de sous-maille, qui n'est pas prise en compte dans ces profils, est de plus en plus importante et peut expliquer le décalage observé.

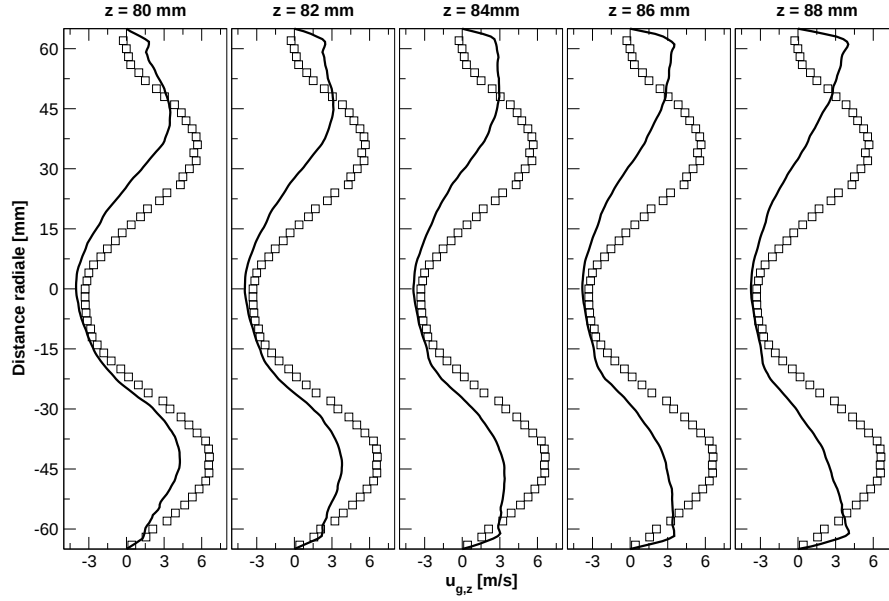


FIG. 9.18: **Cas I** - Profils de vitesse axiale moyenne autour de la position $z = 86$ mm. Symboles : LDA à $z = 86$ mm ; ligne pleine : TTGC_GAZ.

NB : Par la suite, on parle indifféremment de vitesse fluctuante ou de fluctuation RMS pour identifier l'écart-type de vitesse.

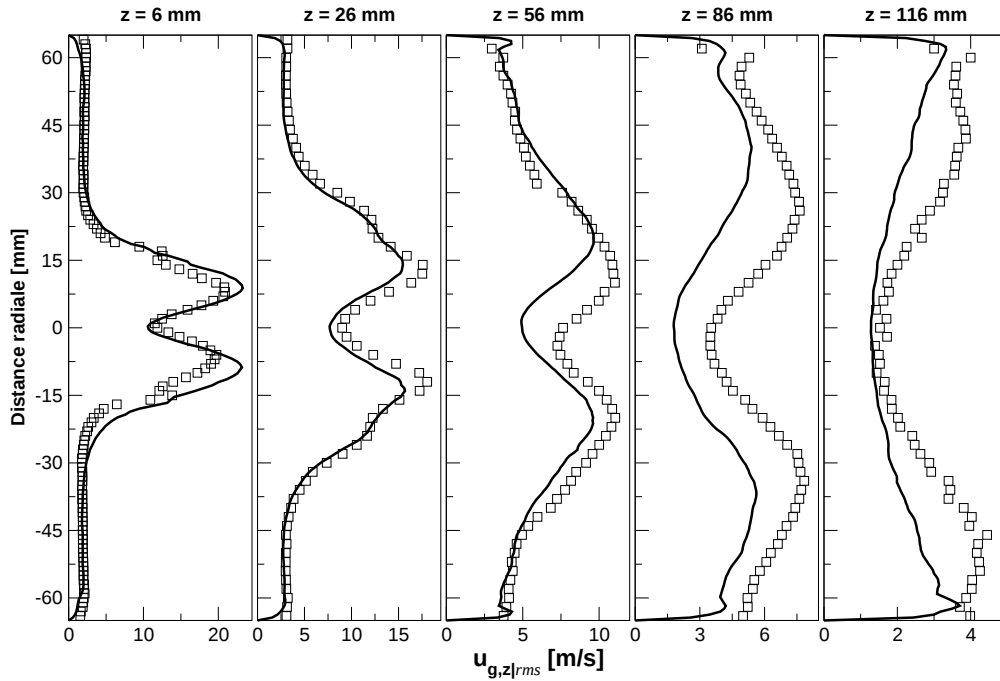


FIG. 9.19: **Cas I** - Profils de fluctuations RMS de vitesse axiale en m/s. Symboles : LDA ; ligne pleine : TTGC_GAZ.

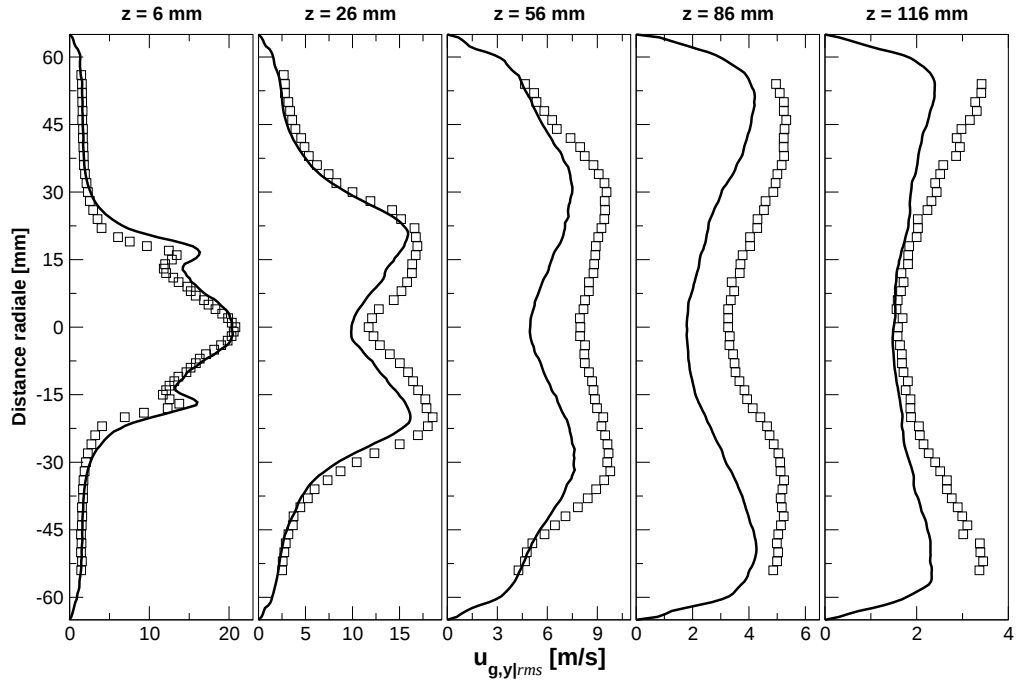


FIG. 9.20: **Cas I** - Profils de fluctuations RMS de vitesse radiale en m/s. Symboles : LDA ; ligne pleine : TTGC_GAZ.

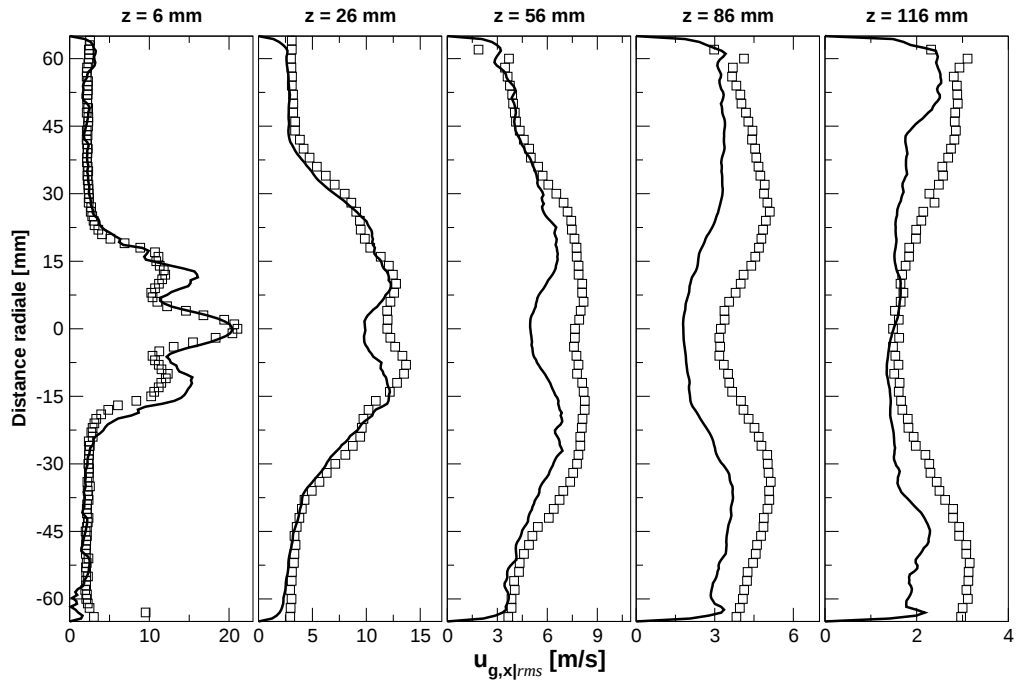


FIG. 9.21: **Cas I** - Profils de fluctuations RMS de vitesse ortho-radiale en m/s. Symboles : LDA ; ligne pleine : TTGC_GAZ.

C'est également sur le profil à $z = 86$ mm que les différences sont les plus importantes avec un niveau de RMS 25% inférieur au niveau mesuré dans les expériences. En effet l'agitation dans la zone de recirculation centrale est bien inférieure à l'agitation des zones amont. Néanmoins la position des *maxima* est très bien capturée pour toutes les composantes, avec seulement un léger décalage vers l'extérieur pour la composante axiale.

9.3 Analyse de l'écoulement diphasique

Dans cette section, une analyse des résultats de la simulation diphasique du **Cas II** est proposée. Seuls les résultats de la simulation TTGC_CMS_RUE_1 sont présentés. Une fois le régime stationnaire atteint, 200 ms de temps physique ont été enregistrées pour établir les statistiques moyennes qui sont comparées aux mesures LDA-PDA au §-9.3.2. Une séquence d'environ 20 ms a également permis d'enregistrer un grand nombre de champs instantanés afin d'analyser les interactions instationnaires entre le spray et l'écoulement gazeux. Cette étude est présentée au §-9.3.3. Les aspects d'évaporation et de dispersion du carburant dans la chambre sont analysés au §-9.3.4. Une décomposition en modes propres est réalisée au §-9.3.5 afin de quantifier en terme de fréquence ces instationnarités. Enfin une analyse des variations temporelle de quantité de mouvement (§-9.3.6) permet d'identifier les différents mécanismes qui influencent la dynamique de la phase liquide.

9.3.1 Visualisations instantanées de la phase dispersée

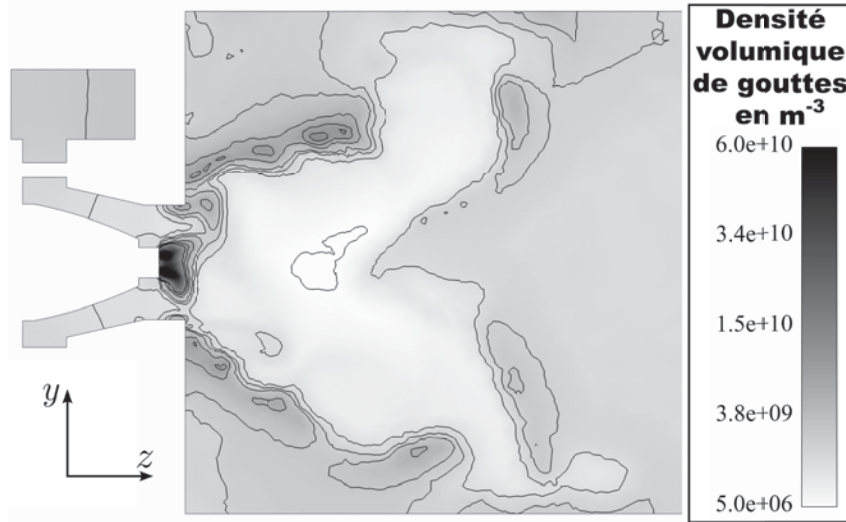


FIG. 9.22: Plan de coupe médiane longitudinale présentant un champ de densité volumique de gouttes $\bar{n}_l$ en m^{-3} .

Sur la Fig. 9.22, un champ instantané de densité volumique de goutte est présenté. Les gouttes injectées au centre de la chambre subissent le mouvement de rotation imposé par l'écoulement vrillé de la phase porteuse. Par effet d'inertie, elles sont chassées du centre

de la chambre. La distribution est fortement non uniforme. Les iso-contours permettent de distinguer des zones de densité plus fortes que d'autres. Cette caractéristique des écoulements dispersés correspond à la concentration préférentielle des particules. Les gouttes ont naturellement tendance à s'agglomérer dans les zones de faible vorticité (Squires & Eaton, 1991).

Des champs instantanés de norme de vitesse des phases liquide et gazeuse sont présentés Fig. 9.23 et 9.24 respectivement. Les zones de fortes vitesses gazeuses conduisent via l'influence de la force de traînée à des fortes vitesses également pour la phase dispersée. Les structures qui apparaissent sur les champs gazeux et liquide n'ont pas les mêmes échelles de variation spatiale. Les structures gazeuses sont beaucoup plus fines, beaucoup plus "déchirées" tandis que les structures de la phase dispersée sont beaucoup plus larges, plus lisses et se dissipent moins rapidement dans l'écoulement. Cet effet est lié à l'inertie des particules qui agit comme un *filtre* de la turbulence.

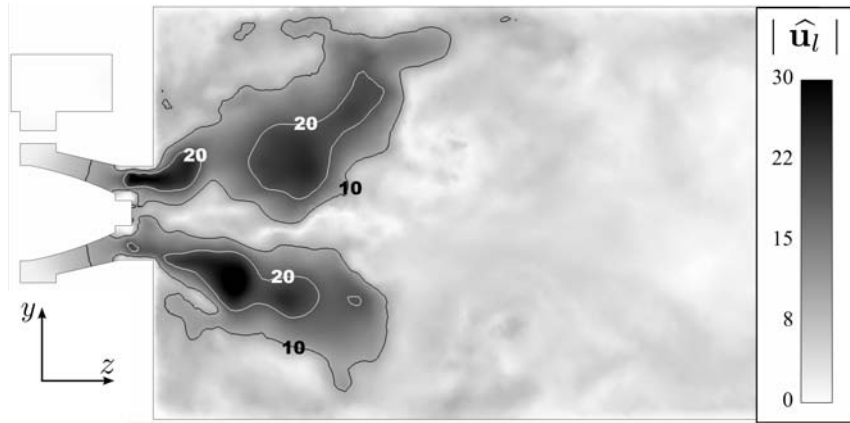


FIG. 9.23: Plan de coupe médiane longitudinale présentant un champ instantané de norme de vitesse liquide en m/s.

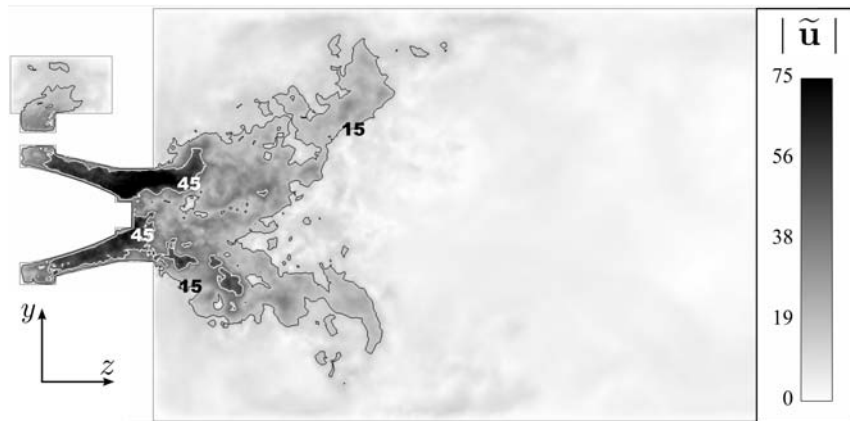


FIG. 9.24: Plan de coupe médiane longitudinale présentant un champ instantané de norme de vitesse gazeuse en m/s.

9.3.2 Comparaison aux mesures expérimentales

Les profils présentés dans cette section correspondent aux composantes de vitesse liquide moyenne et RMS obtenues après 219 ms de temps physique, soit une dizaine de temps convectifs, du calcul TTGC_CMS_RUE.1 qui emploie la stratégie numérique TTGC_RUE_AV_4.

Vitesse liquide moyenne

De manière générale les profils moyens obtenus pour chaque composante de la vitesse liquide (Figs. 9.25, 9.26 et 9.27) sont en très bon accord avec les mesures expérimentales. Seule la composante radiale Fig. 9.27 montre des profils légèrement plus aplatis que dans l'expérience à 26 et 56 mm du fond de chambre.

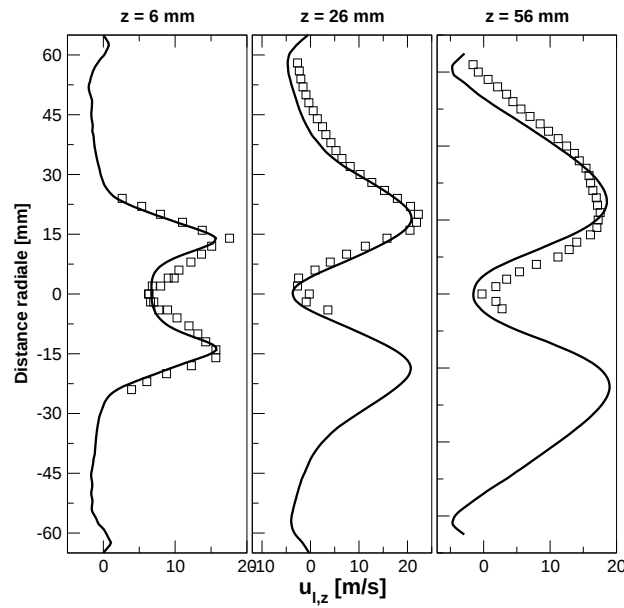


FIG. 9.25: **Cas II** - Profils de vitesse liquide moyenne axiale en m/s. Symboles : LDA ; ligne pleine : TTGC_CMS_RUE.1.

Ces observations permettent de faire deux remarques importantes. La méthodologie développée au Chapitre 7 est une bonne approche pour reproduire l'injection de liquide. Elle permet en aval de retrouver une bonne dynamique du spray. D'autres part, l'approche mésoscopique permet de capturer les principaux phénomènes physiques de la dynamique d'un écoulement diphasique en géométrie complexe. La polydispersion locale a donc un faible effet sur les quantités moyennes.

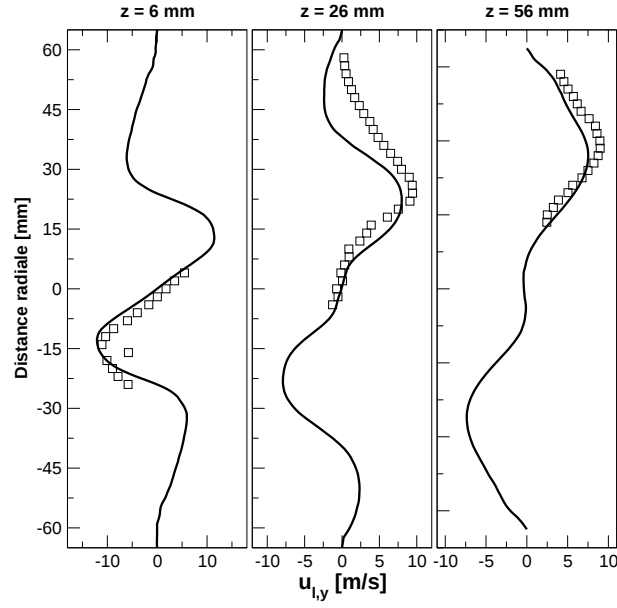


FIG. 9.26: **Cas II** - Profils de vitesse liquide moyenne radiale en m/s. Symboles : LDA ; ligne pleine : TTGC_CMS_RUE.1.

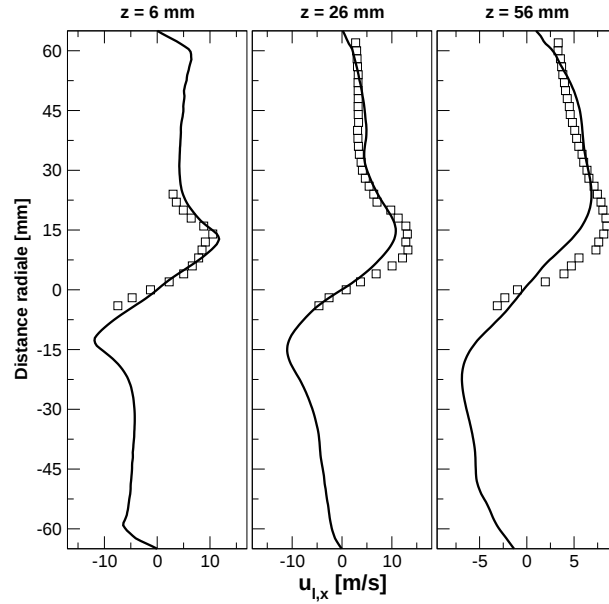


FIG. 9.27: **Cas II** - Profils de vitesse liquide moyenne ortho-radiale en m/s. Symboles : LDA ; ligne pleine : TTGC_CMS_RUE.1.

Fluctuations de vitesse liquide

Les profils d'écart-type de vitesse liquide obtenus par la simulation (Figs. 9.28, 9.29 et 9.30) montrent un faible écart acceptable avec les mesures expérimentales. Les profils obtenus à 6 mm pour les 3 composantes montrent un excellent accord avec les mesures LDA. Les formes et les niveaux des fluctuations sont bien capturées. L'ajout de la contribution de l'énergie décorrélée résolue à l'agitation *mésoscopique* est capitale.

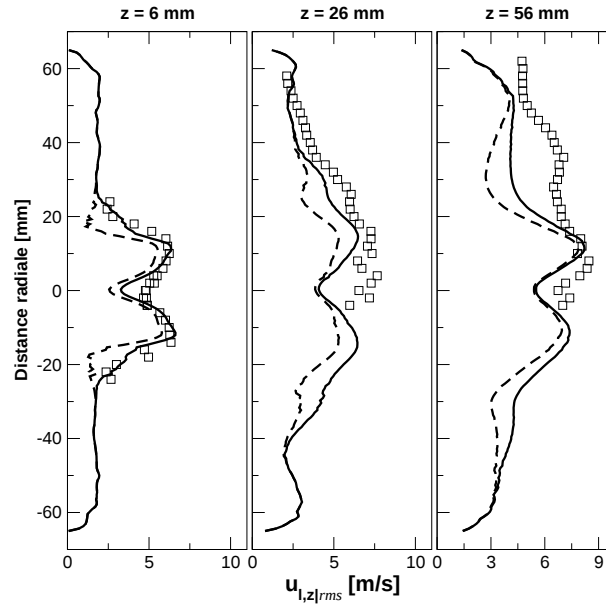


FIG. 9.28: **Cas II** - Profils de fluctuations RMS de vitesse liquide axiale en m/s. Symboles : LDA ; lignes : TTGC-CMS-RUE-1 - pointillée : contribution du mouvement *mésoscopique* résolu seul - pleine : contribution du mouvement *mésoscopique* et décorrélé résolu.

Les profils de fluctuations de vitesse axiale et ortho-radiale à $z = 26$ mm montrent également un très bon accord avec les mesures expérimentales. A l'abscisse $z = 56$ mm, si les niveaux de fluctuations obtenus sont du bon ordre de grandeur, les formes des profils sont incorrectes et certains pics principaux ne sont pas capturés. La même observation peut être faite pour le profil d'écart-type de vitesse ortho-radiale à $z = 26$ mm.

Les écarts peuvent avoir deux causes distinctes. Soit les fluctuations mesurées sur le banc MERCATO sont plus fortement influencés par la polydispersion du spray, c'est à dire que chaque classe de goutte a une agitation distincte, soit la diffusion introduite par l'approche Euler-Euler *mésoscopique* (via le mouvement décorrélé) et/ou la stratégie numérique retenue (via la dissipation artificielle ajoutée) conduit à trop amortir les fluctuations. La comparaison des résultats avec l'approche Lagrangienne d'une part et entre les différentes stratégies numériques d'autre part, nous permettra d'évaluer ces causes possibles. Cette étude est présentée au Chapitre 10.

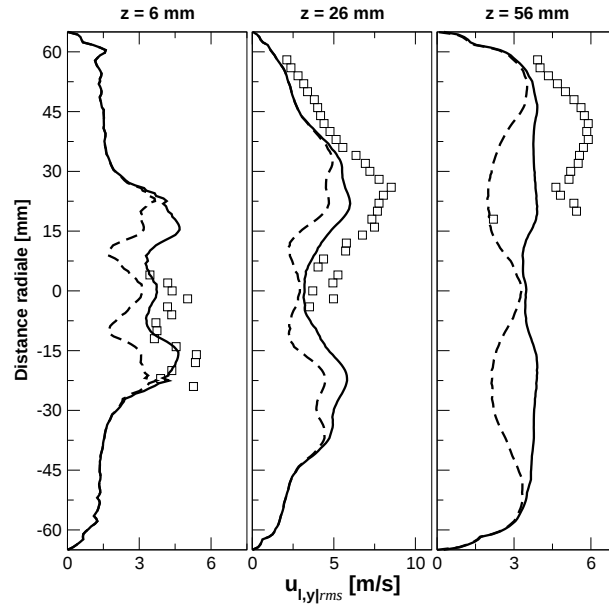


FIG. 9.29: **Cas II** - Profils de fluctuations RMS de vitesse radiale en m/s. Symboles : LDA ; lignes : TTGC_CMS_RUE_1 - pointillée : contribution du mouvement mésoscopique résolu seul - pleine : contribution du mouvement mésoscopique et décorrélé résolu.

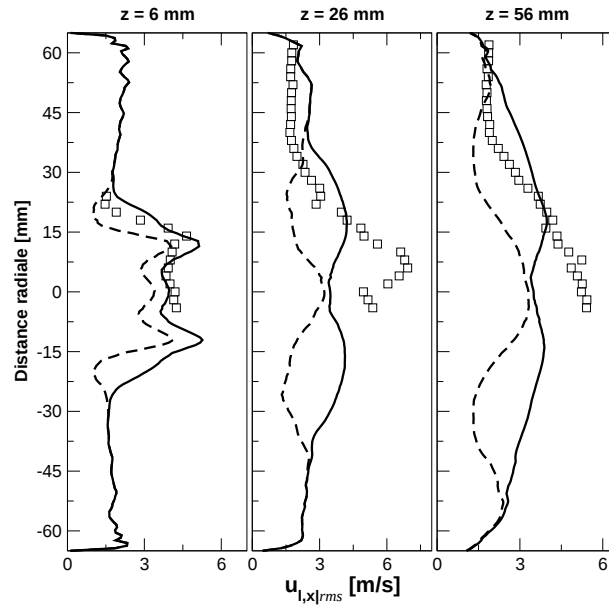


FIG. 9.30: **Cas II** - Profils de fluctuations RMS de vitesse ortho-radiale en m/s. Symboles : LDA ; lignes : TTGC_CMS_RUE_1 - pointillée : contribution du mouvement mésoscopique résolu seul - pleine : contribution du mouvement mésoscopique et décorrélé résolu.

Comparaison des profils de diamètre de gouttes

Les profils de diamètre moyen obtenus avec l'approche Euler-Euler *monodisperse* sont comparés aux mesures PDA à la Fig. 9.31.

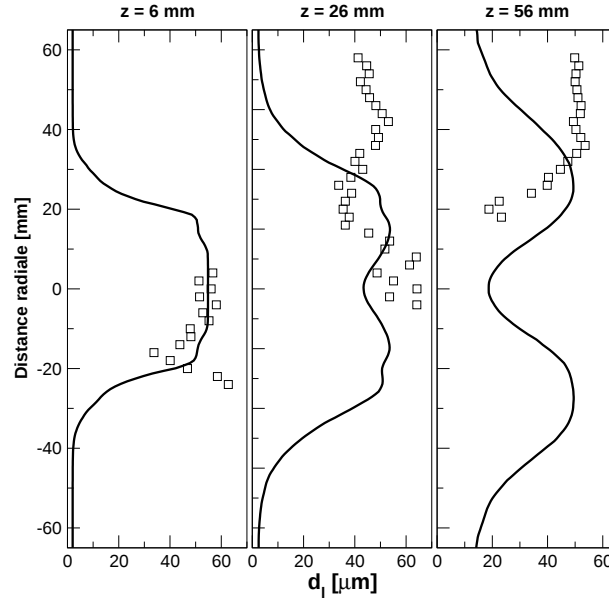


FIG. 9.31: **Cas II** - Profils de diamètre moyen en μm . Symboles : PDA ; ligne pleine : TTGC-CMS_RUE.1.

L'approche Euler-Euler *monodisperse*, est tout a fait capable de résoudre une *polydispersion spatiale* du spray dans la chambre. Les gouttes de grand diamètre sont éjectées du centre vers l'extérieur. On constate que si les *maxima* ont le bon niveau par rapport aux mesures expérimentales, ils ne sont pas correctement positionnés et ont tendance à rester plus près de l'axe. La comparaison avec l'approche Euler-Lagrange au Chapitre 10 nous apportera des diagnostics plus fins.

Les profils de fluctuation RMS de diamètre obtenu avec l'approche Euler-Euler *monodisperse* sont comparés aux mesures PDA à la Fig. 9.32. On constate que les fluctuations mesurées sont très en dessous des mesures expérimentales. Cela signifie que les fluctuations de diamètre mesurées par la PDA correspondent essentiellement à des effets de polydispersion locale du spray qui n'est pas résolue dans l'approche Euler-Euler *mésoscopique monodisperse*.

Une extension de l'approche Euler-Euler *mésoscopique* au *multi-fluide* (Laurent *et al.*, 2004) est actuellement en cours de développement dans AVBP par Vié (2010). Des calculs d'évaluation de la méthode ont été réalisés sur la configuration MERCATO, en prenant en compte 5 à 10 classes de gouttes. Cette approche permet de capter un polydispersion locale en résolvant la dynamique associée à chaque classe de gouttes.

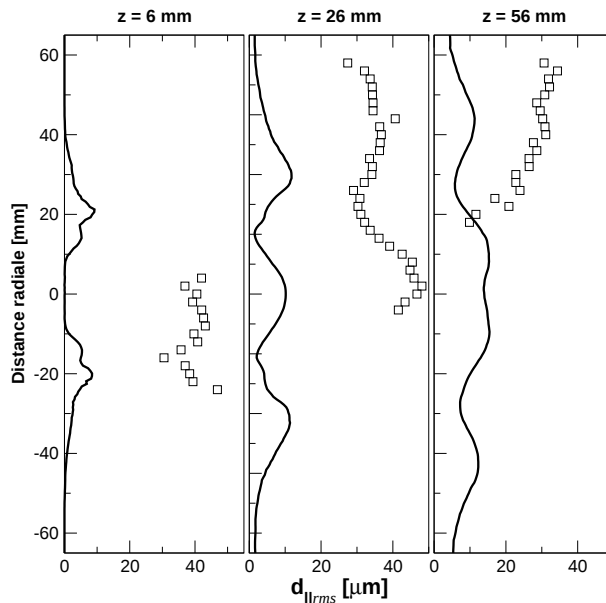


FIG. 9.32: **Cas II** - Profils d'écart-type de diamètre moyen en μm . Symboles : LDA ; ligne pleine : TTGC_CMS_RUE.1.

Pour conclure, on peut noter que malgré une répartition de diamètre pas très bien reproduite par la simulation EE *mésoscopique* monodisperse et une polydispersion locale non prise en compte par la simulation, les profils de vitesse moyenne et fluctuante sont très satisfaisants. La dynamique de la phase dispersée est pilotée par la classe de gouttes de taille moyenne. Cet effet peut être relié à la faible dispersion des nombres de Stokes dans l'écoulement. Dans des travaux futurs, la comparaison des résultats des approches monodisperse et multi-fluide, permettra de comprendre l'influence des autres classes sur la dynamique de la phase dispersée et sur la distribution de diamètre et de carburant.

9.3.3 Interaction spray et turbulence

Le spray liquide se déstabilise sous l'action de l'écoulement vrillé. On peut observer sur la Fig. 9.33 plusieurs champs instantanés successifs de fraction volumique de liquide. Sur l'axe de la chambre, la fraction de liquide est faible : par effet centrifuge les gouttes de carburant en rotation sont chassées du centre de la chambre. En revanche, dans la direction du jet, des structures de concentration importante de fraction volumique sont convectées. Proche de l'injection on peut distinguer un battement haut/bas de la poche de forte concentration. Cette observation est à rapprocher des visualisations de la phase dispersée réalisées sur le banc MERCATO par tomographie laser, reproduites à la Fig. 1.6.

Ce battement est en fait un phénomène tridimensionnel lié à la giration de l'écoulement gazeux. Une vue 3D du spray liquide est proposée à la Fig. 9.34. On observe une structure tournante interagissant avec la structure tourbillonnaire cohérente : le PVC. Ces deux

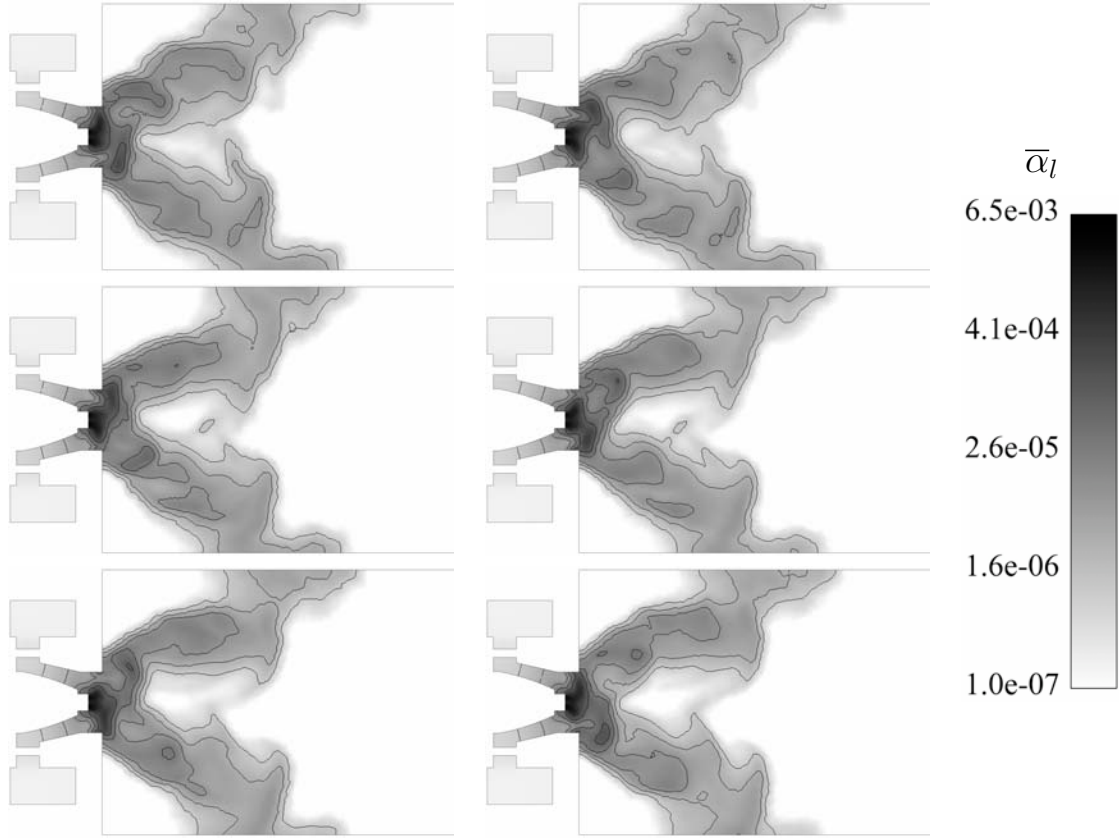


FIG. 9.33: Champs instantanés de fraction volumique de liquide sur une coupe longitudinale. Les lignes noires matérialisent les isocontours $\bar{\alpha}_l = 1.0 \times 10^{-4}$, 3.2×10^{-5} , 1.0×10^{-5} , 3.2×10^{-5} et 1.0×10^{-6} .

structures semblent suivre le même mouvement de précession, la structure du spray suivant la structure de l'écoulement gazeux. La structure liquide ainsi identifiée pilote l'évolution spatiale et temporelle des différentes grandeurs de la phase liquide dans cette zone proche injection.

Le champ de vitesse axiale moyenne de la phase gazeuse (Fig. 9.35(haut)) n'est pas modifié par rapport au champ correspondant au calcul monophasique (Fig. 9.11) : la charge en liquide est faible pour ce point de fonctionnement.

La zone de recirculation centrale du champ liquide, comparée à celle du champ gazeux, est repoussée en aval de la chambre du fait de l'inertie des gouttes. La zone de fortes vitesses est plus large que celle du champ gazeux, et génère par effet centrifuge un tri balistique des gouttes conduisant aux profils à deux bosses observés à 26 et 56 mm sur les profils issus de la simulation (Fig. 9.31).

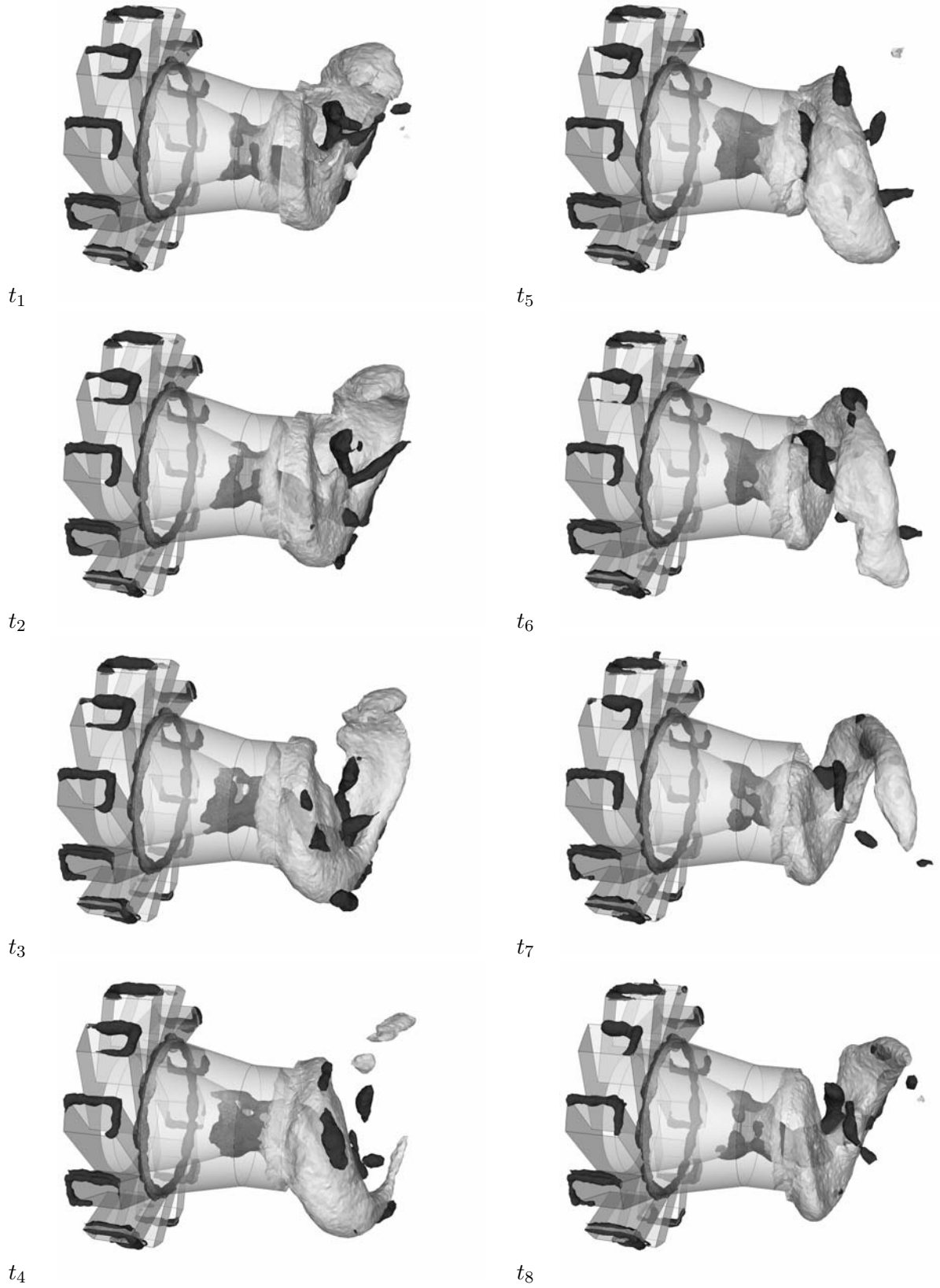


FIG. 9.34: Visualisation de l'interaction du spray avec le PVC. L'iso-surface de fraction volumique de liquide $\bar{\alpha}_l = 5.0 \times 10^{-5}$ est colorée en blanc, l'iso-surface de critère $Q = 1.2 \times 10^8 s^{-2}$ représentant le PVC est colorée en noir.

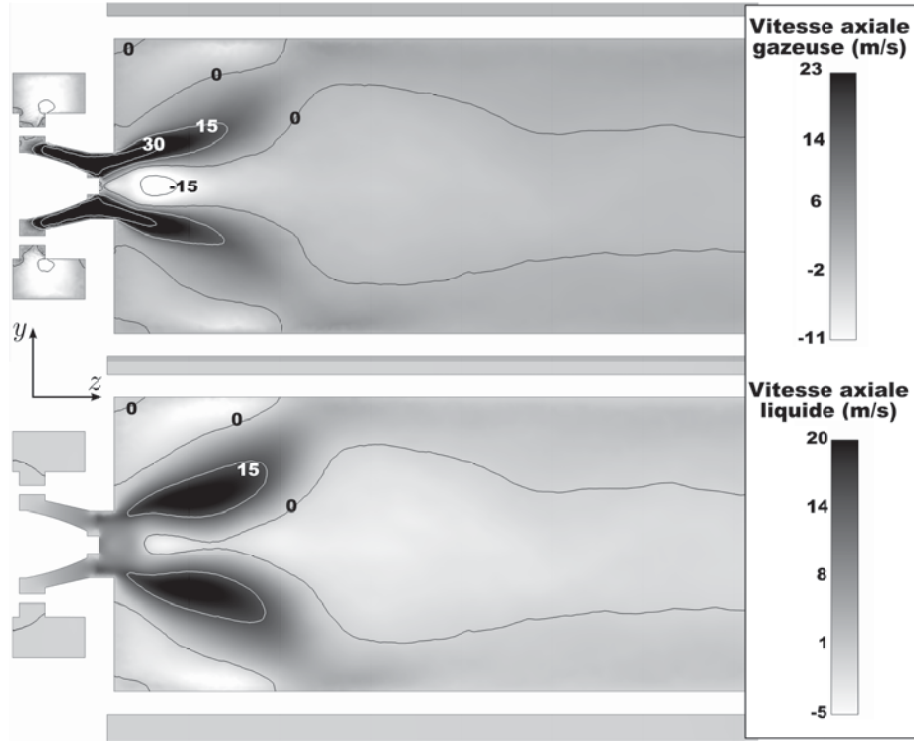


FIG. 9.35: *Champ de vitesse axiale moyenne pour la phase gazeuse (haut) et liquide (bas) sur la coupe longitudinale.*

Le champ d'énergie décorrélée est représenté Fig. 9.36. La zone de *vortex breakdown* est l'unique région où l'énergie RUE est importante. Le cisaillement de vitesse liquide est en effet un mécanisme important de production d'énergie RUE. Le terme de pression P_{RUE} (Tab. 3.1) conduit à redistribuer les gouttes à l'extérieur de cette zone de forte énergie décorrélée, tandis que le terme de diffusion par l'énergie décorrélée tend à redistribuer les fortes vitesses mésoscopiques résolues sur une plus large zone comme observé Fig. 9.35.

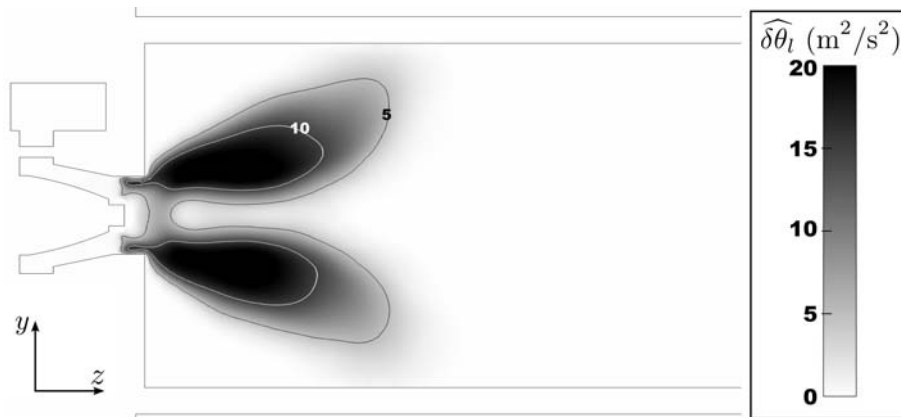


FIG. 9.36: *Champ de d'énergie décorrélée moyenne sur la coupe longitudinale.*

9.3.4 Évaporation et distribution de carburant

Un champ instantané de richesse gazeuse est présenté Fig. 9.38. Les iso-contours de taux d'évaporation permettent de localiser les zones de production de vapeur de carburant. On distingue deux zones où le taux d'évaporation est important. La première zone, proche injection, suit la structure tournante où le spray est dense, visualisée à la Fig. 9.34 par l'iso-surface blanche. La seconde est "accrochée" sur les parois de la chambre. Cette zone est favorable à l'évaporation car les gouttes y sont plus chaudes (elles ont atteint la température d'équilibre avec l'air à 463 K : $T_{wb} \approx 410$ K.) et ont un diamètre plus faible, comme le montrent les champs des Figs. 9.37 et 9.39.



FIG. 9.37: Coupe longitudinale médiane présentant une répartition instantanée de diamètre moyen du spray.

Le carburant produit par évaporation dans la zone proche injection est dispersé par la forte turbulence de l'écoulement gazeux qui favorise le mélange, et convecté en aval vers la sortie à l'air ambiant. En revanche, le carburant produit dans la zone en bordure de spray est piégé dans la zone de recirculation de coins de la chambre où les niveaux de richesse atteignent $\Phi_g = 0.7$. Les amas de concentration préférentielle de gouttes conduisent à des fluctuations de richesse importantes tout le long de la direction principale du spray.

Le champ instantané de température liquide présenté à la Fig. 9.39 montre que les échanges thermiques sont plus rapides que les échanges de masse, comme cela a été identifié au §-6.4.2 dans le cas d'une évaporation d'une goutte isolée de KERO_LUCHE dans une atmosphère infinie au repos. Les gouttes se réchauffent rapidement et atteignent la température d'équilibre $T_{wb} \approx 410$ K. Les échanges thermiques, confinés dans la zone proche injection, sont également influencés par les structures tridimensionnelles comme on peut le voir par la forme des isolignes de transfert d'enthalpie sur la Fig. 9.39.

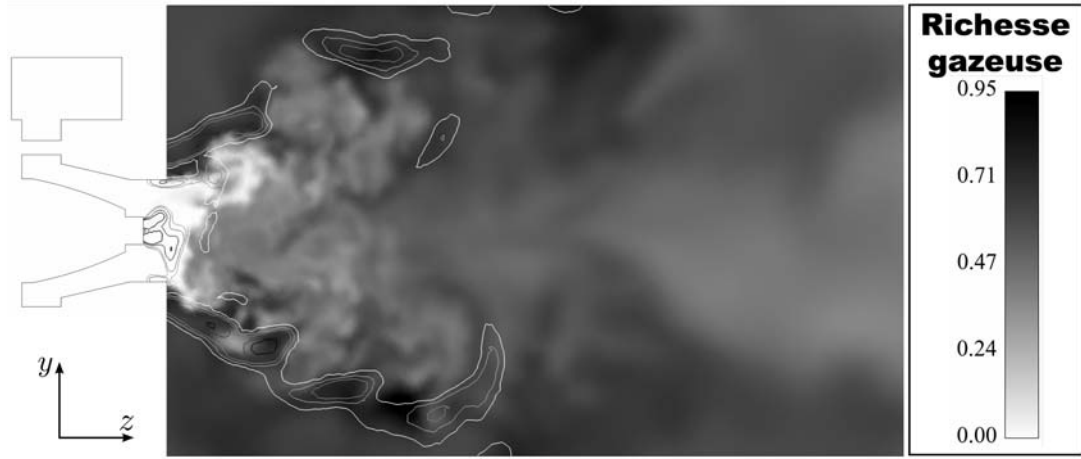


FIG. 9.38: Coupe longitudinale médiane présentant un champ instantané de richesse gazeuse. Les lignes sont des iso-contours du taux d'évaporation $\bar{\Gamma} = 5, 2$ et $1 \text{ kg/m}^{-3}/\text{s}$.

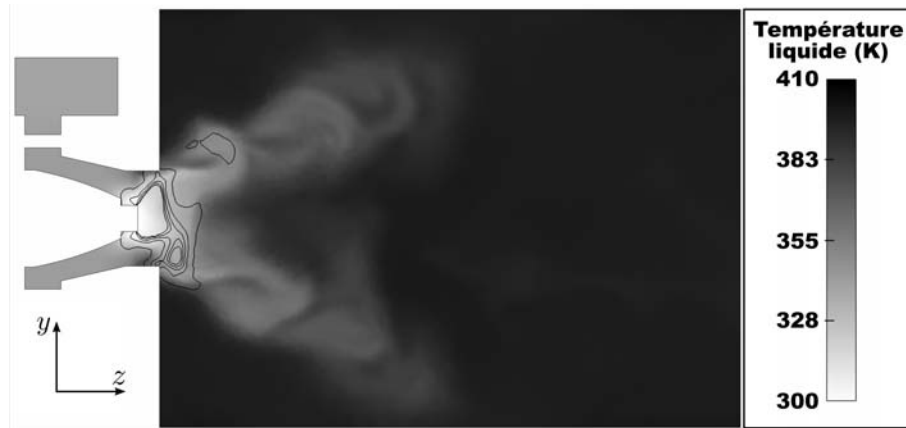


FIG. 9.39: Champ de température des gouttes en K. Les lignes noires sont des iso-contours du flux d'enthalpie $\bar{\Pi}_g$ lié au mécanisme d'évaporation.

9.3.5 Analyse fréquentielle de l'écoulement diphasique

Analyse spectrale

Afin de déterminer les fréquences des phénomènes instationnaires observés, des sondes ont été disposées dans le domaine de calcul et notamment dans la chambre près de la sortie du diffuseur. Dans cette étude, nous nous concentrons sur l'étude des signaux de pression de deux sondes, numérotées 1 et 2, positionnées à 10 mm du fond de chambre respectivement à $1/3$ et $2/3$ de la demi-largeur de la chambre. Elles sont représentées sur la Fig. 9.40.

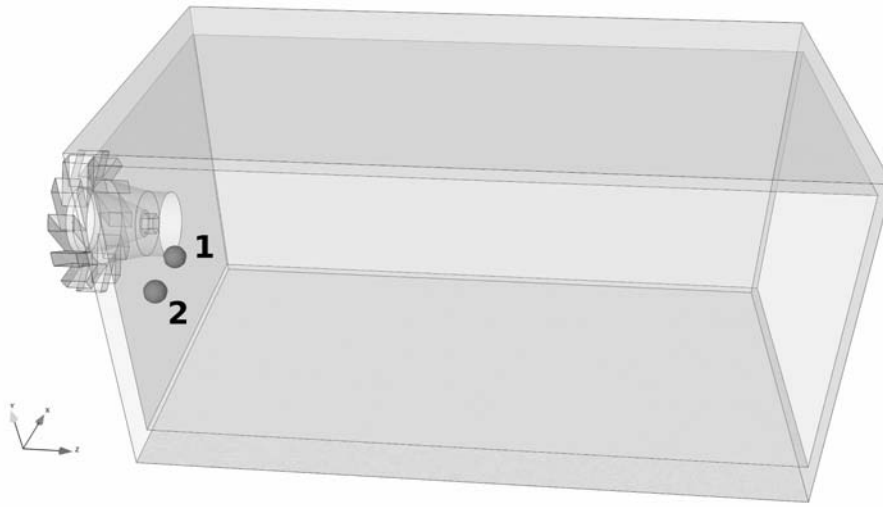


FIG. 9.40: *Positionnement des sondes dans la chambre de combustion.*

La transformée de Fourier des fluctuations de pression recueillies aux sondes 1 et 2 pendant 400 ms, permet d'identifier 3 pics qui se détachent des spectres Fig. 9.41 : 335 Hz, 830 Hz et la première harmonique du second pic à 1660 Hz. Ces mêmes fréquences ont pu également être identifiées dans le signal de pression mesuré expérimentalement sur le banc MERCATO dans un coin de la chambre de combustion. Le spectre des fluctuations de pression enregistrées (Lecourt, 2008c) est reproduit à la Fig. 9.42. Les trois fréquences identifiées dans la simulation (légèrement décalées) sont retrouvées parmi plusieurs autres pics. La capture de ces fréquences démontre encore une fois que la LES est très bien adaptée pour capturer des phénomènes instationnaires.

Le pic à 830 Hz est beaucoup plus fort sur la sonde 1 que sur la sonde 2 où apparaissent également les harmoniques 1 et 2. La fréquence 335 Hz est en revanche plus visible sur le spectre de la sonde 2. Les pics correspondent à l'empreinte fréquentielle de structures cohérentes et instationnaires.

Si l'on s'intéresse à la dernière partie des spectres pour $f > 2000$ Hz, on observe une importante différence entre les spectres de la sonde 1 et 2. Pour la première sonde, on observe une décroissance régulière de l'amplitude du fait de la dissipation turbulente. Pour

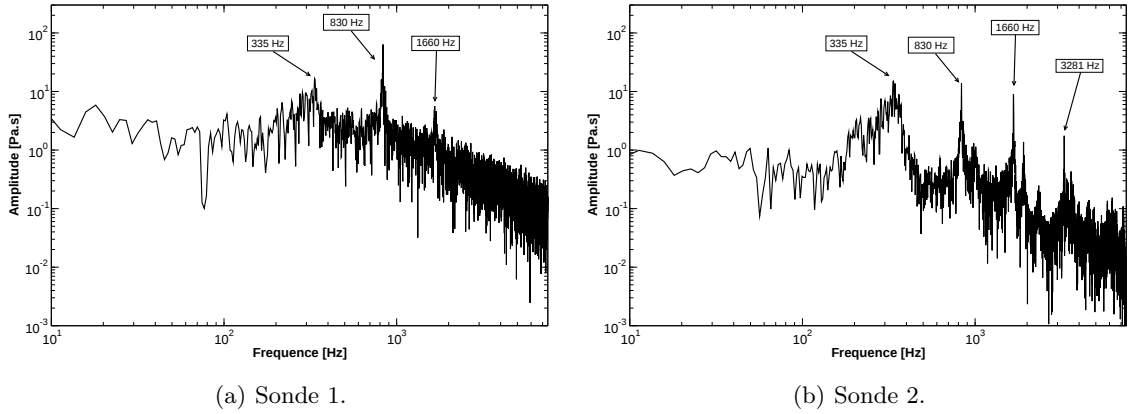


FIG. 9.41: Spectre des fluctuations de pression enregistrées au cours de 400 ms de temps physique de la simulation *TTGC_GAZ*.

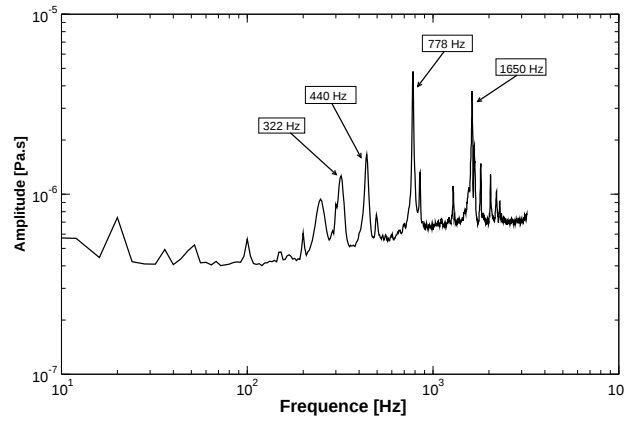


FIG. 9.42: Spectre des fluctuations de pression enregistrées sur un coin des parois de la chambre de combustion du banc expérimental MERCATO au point de fonctionnement $W_R = 0.32$ (Lecourt, 2008c).

la deuxième sonde en revanche, la décroissance n'est pas régulière. Dans cette zone plus proche de la paroi et à l'extérieur de la zone de fort cisaillement la dissipation turbulence est moins homogène et fortement marquée par les grandes structures (recirculations) de l'écoulement de coins.

Décomposition en modes propres

Afin d'identifier les structures associées aux fréquences enregistrées sur les signaux de pression, une décomposition en modes propres est réalisée. La décomposition en modes propres (POD²) a été initialement introduite pour l'analyse de données expérimentales

²pour *Proper Orthogonal Decomposition* en anglais

d'écoulements turbulents incompressibles (Berkooz *et al.*, 1993). L'objectif de cette approche est de représenter les quantités d'intérêt, comme la pression, les vitesses, en une série de fonctions orthogonales obtenues en minimisant l'erreur associée à un opérateur de projection. De cette description modale de l'écoulement, il résulte une distribution énergétique des structures, chacune caractérisée par une évolution spatiale et temporelle propre. Un outil POD a été développé par Roux (2009) dans son travail de thèse et validé par Grau (2007) au cours de son stage de master. L'outil POD par clichés consiste à résoudre un problème aux valeurs propres permettant d'obtenir une base de M vecteurs propres $\phi^i(\mathbf{x})$, $i \in [1, M]$ et une évolution temporelle associée $a^i(t_n)$ permettant d'écrire l'ensemble des N_t solutions enregistrées $q_n(\mathbf{x})$ à l'instant t_n selon la décomposition suivante :

$$q_n(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^M a^i(t_n) \phi^i(\mathbf{x}) \quad (9.19)$$

La construction de la base de vecteurs propres nécessite de définir un opérateur de projection (Grau, 2007; Roux, 2009). Le mode propre spatial se construit selon :

$$\phi^i = \frac{1}{N_t \lambda^i} \sum_{n=1}^{N_t} a^i(t_n) \quad (9.20)$$

où la valeur propre λ^i correspond à l'énergie associée au mode propre ϕ^i :

$$\lambda^i = \frac{1}{N_t} \sum_{n=1}^{N_t} (a^i(t_n))^2 \quad (9.21)$$

Cet outil a été déployé sur un ensemble de $N_t = 500$ solutions instantanées couvrant 20 ms de temps physique du calcul diphasique identifié TTGC_CMS_RUE_1. La fréquence d'échantillonnage est d'environ $f_e = 25000 \text{ Hz}$ et la résolution fréquentielle est de 50 Hz. L'analyse est réalisée sur les fluctuations de pression et les fluctuations de fraction volumique liquide. Les valeurs propres associées aux modes de la décomposition déterminent l'importance de chaque vecteur propre. Seuls les premiers modes les plus énergétiques ont une réelle signification.

- *Modes propres des fluctuations de pression*

Parmi les modes propres présentés par ordre décroissant d'amplitude Fig. 9.43, seuls les 5 premiers modes associés aux plus grandes valeurs propres ont une signification physique.

Le premier mode ϕ^1 de la décomposition POD correspond à un mode acoustique longitudinal de la chambre de combustion. Son amplitude est représentée dans le plan de coupe longitudinale médiane de la chambre sur la Fig. 9.44. Il s'agit d'un mode quart-d'onde. Le champ d'amplitude du mode propre est pollué par la trace des structures tourbillonnaires très énergétiques en zone proche injection. En analysant l'évolution temporelle a^1 associée à ce vecteur propre ϕ^1 (Fig. 9.45), on peut obtenir la fréquence associée à ce mode acoustique dans le calcul : 335 Hz.

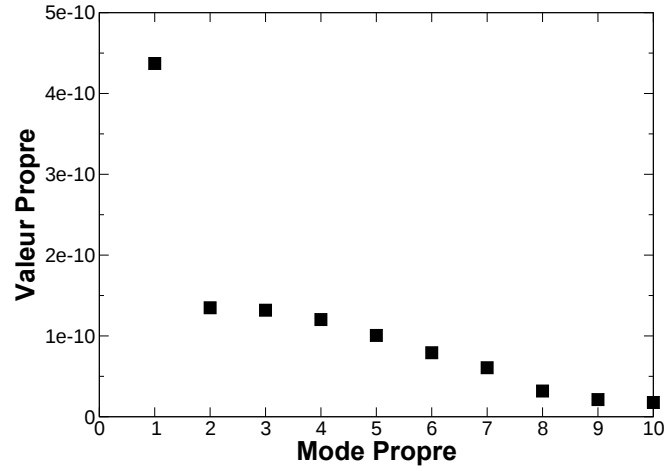


FIG. 9.43: *Energie associée λ^i aux vecteurs propres obtenus ϕ^i par décomposition des champs de fluctuations de pression.*

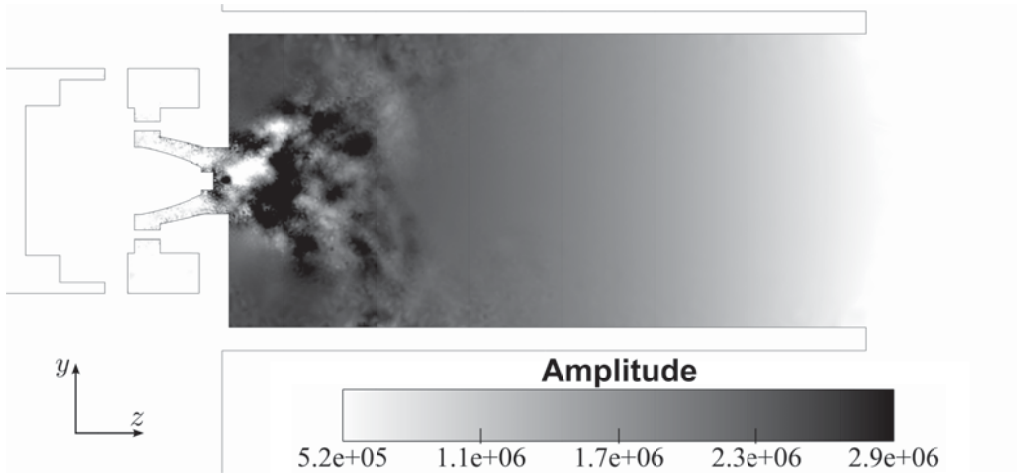


FIG. 9.44: **Premier mode :** *Répartition spatiale de l'amplitude du vecteur propre. Décomposition POD réalisée sur les champs de fluctuations de pression.*

Ainsi la fréquence 335 Hz identifiée sur les spectres de pression correspond donc au mode acoustique quart-d'onde de la chambre de combustion.

Le deuxième et le quatrième modes correspondent à un doublet de fréquence 830Hz, déphasés d'un quart de période (Fig. 9.46). Ce doublet correspond à un mode hydrodynamique, comme cela est identifié à la Fig. 9.47 par des iso-contours d'amplitude minimale et maximale du vecteur propre.

³Les solutions sont enregistrées toutes les 200 itérations ce qui ne garantit pas un pas de temps fixe.

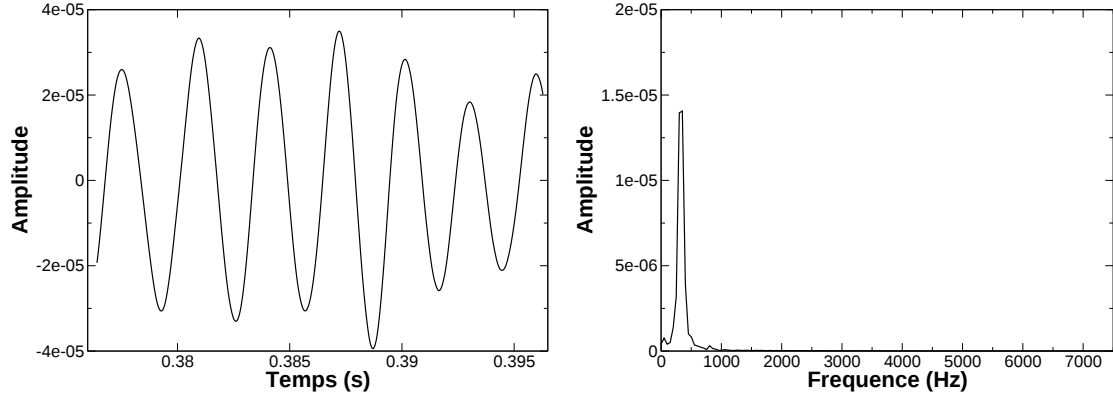


FIG. 9.45: **Premier mode** : Evolution temporelle et spectre associé. Décomposition POD réalisée sur les champs de fluctuations de pression.

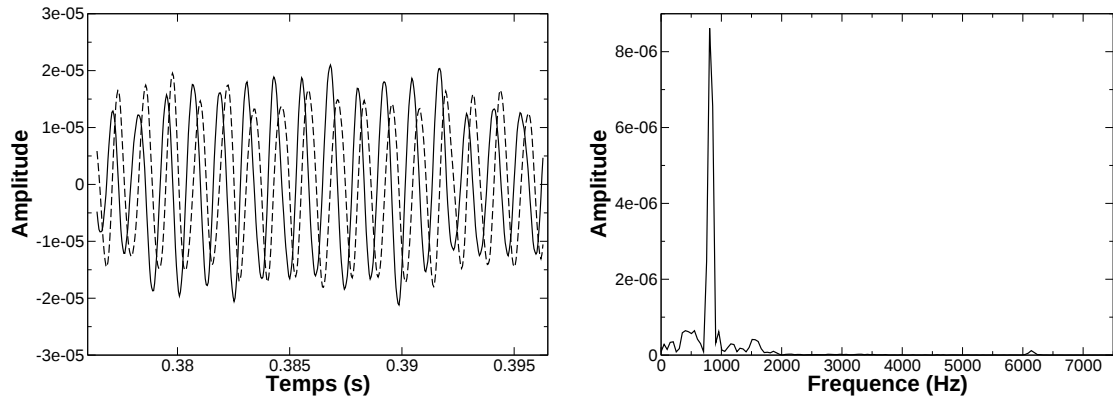


FIG. 9.46: **Deuxième et quatrième modes** : Evolution temporelle et spectre associé. Décomposition POD réalisée sur les champs de fluctuations de pression. La ligne pleine correspond à l'évolution temporelle du deuxième mode, la ligne pointillée correspond à l'évolution du quatrième mode.

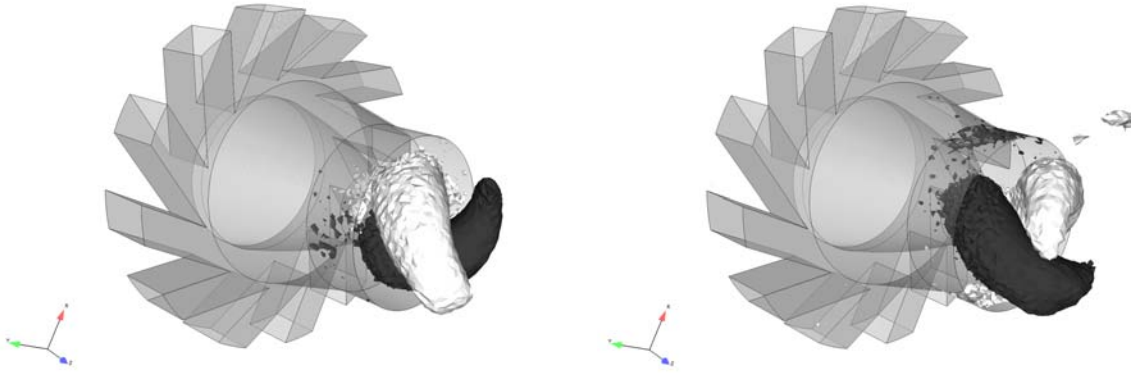


FIG. 9.47: **Deuxième et quatrième modes :** Pour chaque mode, deux isosurfaces d'amplitude maximale (2.5×10^5) en noir et minimale (-2.5×10^5) en blanc du vecteur propre sont représentées pour matérialiser la structure. Décomposition POD réalisée sur les champs de fluctuations de pression.

On peut alors reconstruire l'évolution temporelle des fluctuations de pressions selon l'Eq. (9.19) correspondant à ce mode hydrodynamique par combinaison linéaire des vecteurs propres des modes ϕ^2 et ϕ^4 au cours du temps. On retrouve la structure identifiée précédemment comme étant le PVC. Sur la Fig. 9.48, trois clichés instantanés du champ de fluctuations de pression reconstruit sont présentés. L'isosurface $p' = 220$ Pa matérialise le mode hydrodynamique tournant.

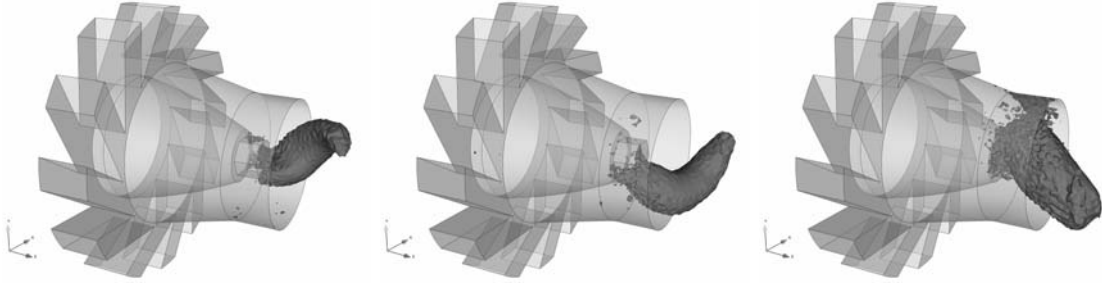


FIG. 9.48: **Deuxième et quatrième modes** : Isosurface de fluctuations de pression reconstruites $p' = 220$ Pa à trois instants successifs.

Les troisième et cinquième modes correspondent également à un doublet de fréquence 6200 Hz, déphasés d'un quart de période (Fig. 9.49).

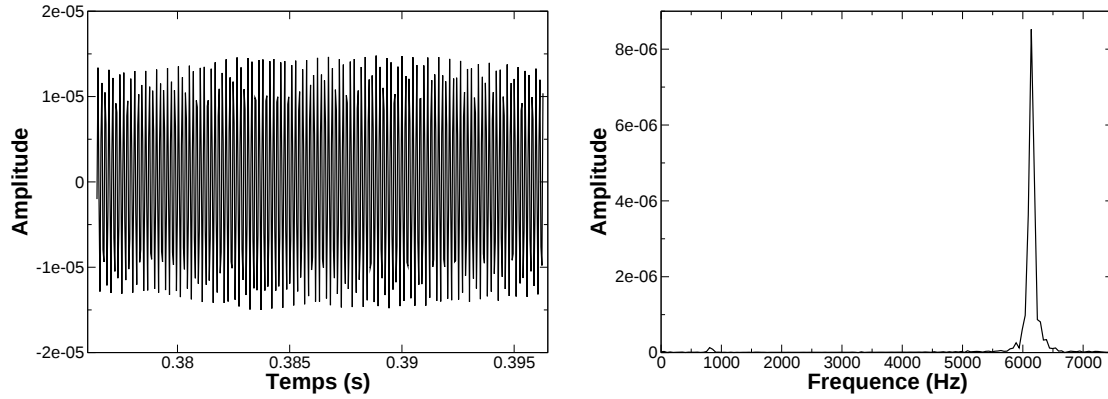


FIG. 9.49: **Troisième et cinquième modes** : Evolution temporelle et spectre associé. Décomposition POD réalisée sur les champs de fluctuations de pression.

Cette haute fréquence est associée aux tourbillons formés dans la couche de cisaillement du jet vrillé, identifiés par des isocontours sur la Fig. 9.50. Les tourbillons lâchés par la couche de mélange sont ensuite entraînés par la rotation d'ensemble de l'écoulement. Ainsi on voit apparaître sur la structure du mode des stries vrillées.

Cette fréquence ne ressort pas dans les spectres présentés à la Fig. 9.41, certainement masquée par l'ensemble des mécanismes de dissipation turbulente responsables de la décroissance des spectres à partir de 2000 Hz.

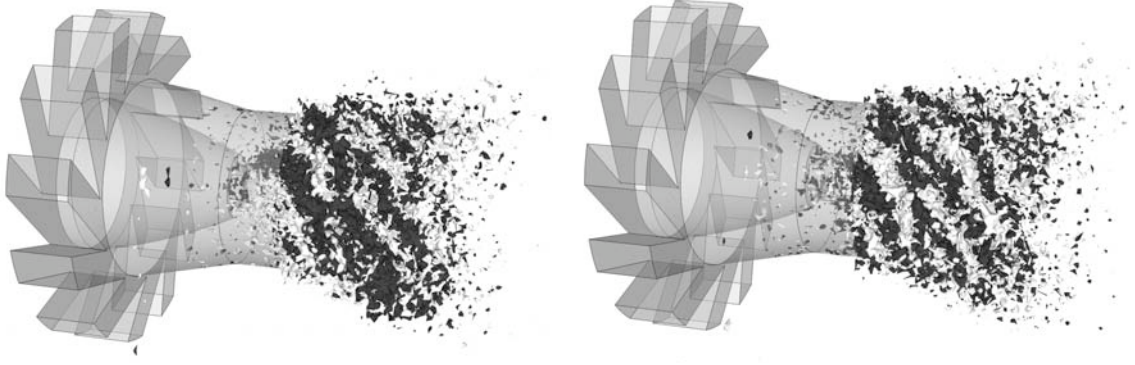


FIG. 9.50: **Troisième et cinquième modes** : Pour chaque mode, deux isosurfaces d'amplitude maximale (9×10^5) en noir et minimale (-9×10^5) en blanc du vecteur propre sont représentées pour matérialiser la structure. Décomposition POD réalisée sur les champs de fluctuations de pression.

- *Modes propres des fluctuations de fraction volumique de liquide*

Parmi les modes propres obtenues par l'outil de traitement et présentés Fig. 9.51, seuls les 4 premiers sont analysés, car les suivants ont une énergie associée trop faible.

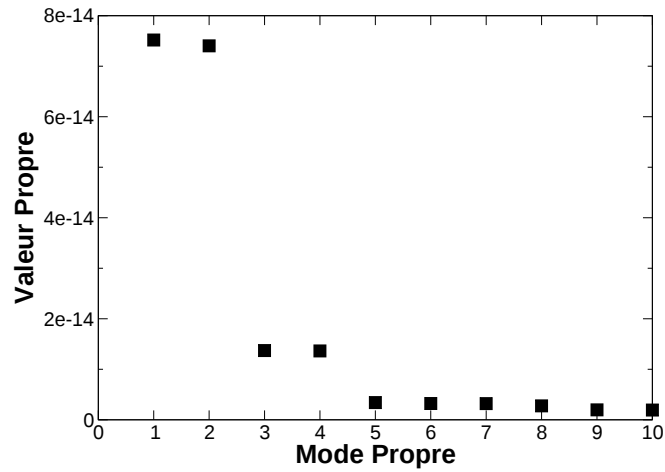


FIG. 9.51: *Energie associée aux valeurs propres obtenues par décomposition des champs de fluctuations de fraction volumique.*

Les deux premiers modes forment un doublet dont l'amplitude est déphasée d'un quart de période. La fréquence associée à cette paire est 830 Hz comme pour le PVC.

La structure de ce doublet représentée à la Fig. 9.53 correspond à la structure du spray identifiée sur le scénario Fig. 9.34 qui interagit avec le PVC gazeux.

Les deux modes suivants sont en fait les harmoniques des précédents (Fig. 9.54

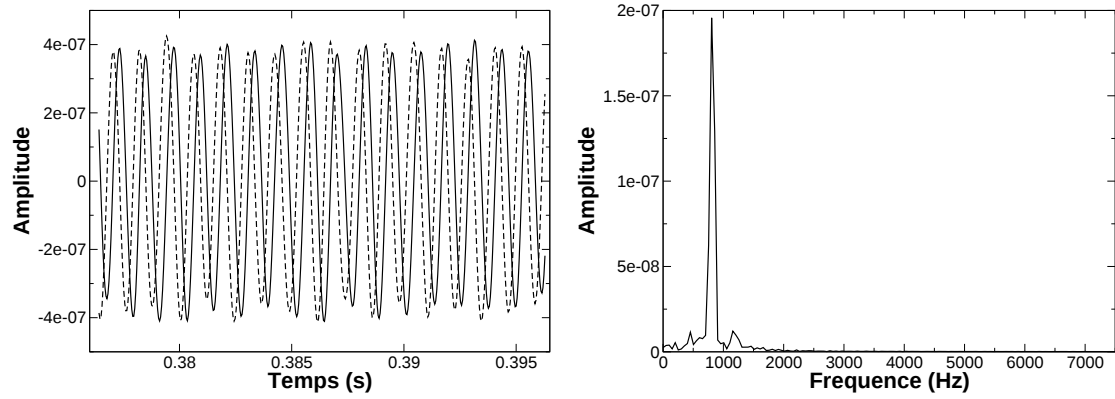


FIG. 9.52: **Premier et deuxième modes** : Evolution temporelle et spectre associé. Décomposition POD réalisée sur les champs de fluctuations de fraction volumique de liquide. La ligne pleine correspond à l'évolution temporelle du deuxième mode, la ligne pointillée correspond à l'évolution du quatrième mode.

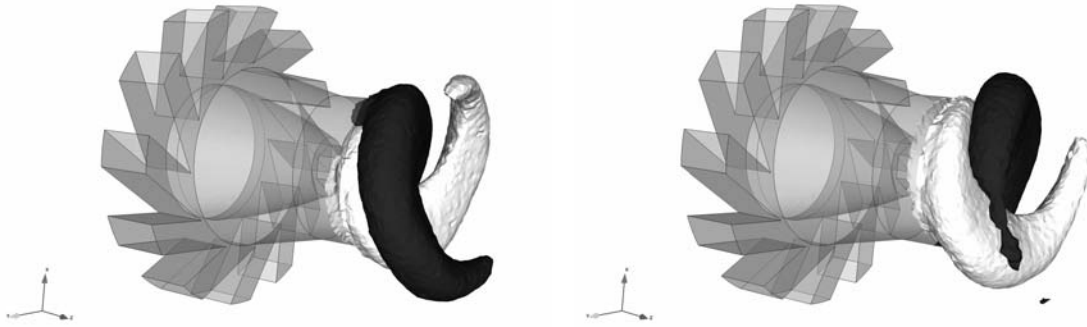


FIG. 9.53: **Premier et deuxième modes** : Pour chaque mode, deux isosurfaces d'amplitude maximale (70) en noir et minimale (-70) en blanc sont représentées pour matérialiser la structure. Décomposition POD réalisée sur les champs de fluctuations de fraction volumique de liquide.

(gauche)). Leur évolution temporelle se fait à la fréquence de 1660 Hz. La structure du mode 3 est présentée à la Fig. 9.54 (droite).

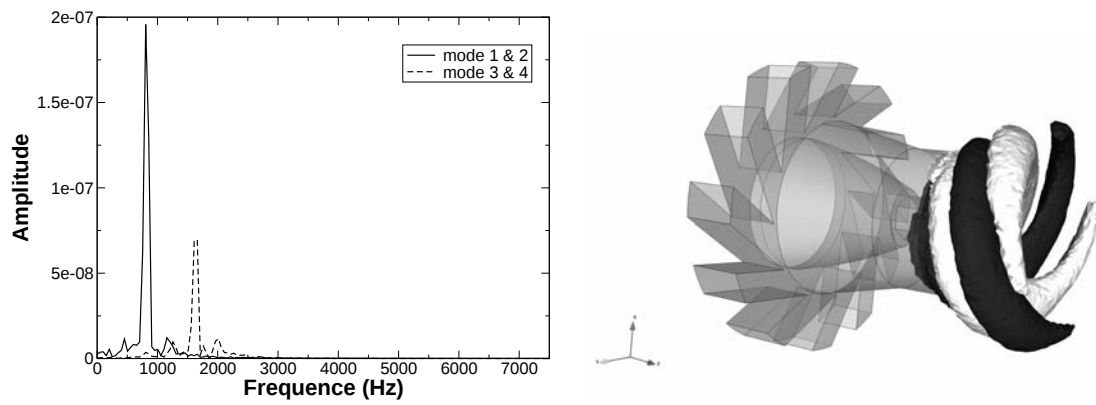


FIG. 9.54: Troisième et quatrième modes : Spectre du doublet de vecteur propre. Deux iso-surfaces d'amplitude maximale (70) en noir et minimale (-70) en blanc sont représentées pour matérialiser la structure.

Conclusions

La POD a permis de caractériser les phénomènes instationnaires associés aux fréquences qui apparaissent dans les spectres de pression de la chambre.

- Le mode le plus énergétique, est le mode acoustique à 335 Hz, qui correspond à un mode acoustique quart d'onde de la chambre de combustion. En effet, la géométrie très simple de la chambre de combustion favorise la présence de fréquences acoustiques bien marquées.
- A 830 Hz les deux structures hydrodynamiques identifiées à la Fig. 9.34 de l'écoulement diphasique ont été mises en évidence : il s'agit du PVC et de la structure du spray qui suivent un mouvement de précession dans la zone proche injection.
- La décomposition a également permis d'identifier le mécanisme de lâcher tourbillonnaire du jet d'air vrillé. Ce mécanisme participe à la dissipation turbulente.

Des structures instationnaires fortes influencent la dynamique des deux phases gazeuse et liquide. La méthode Euler-Euler pour la LES est tout a fait capable de capter une dynamique instationnaire. Le paragraphe suivant permet d'identifier et de quantifier les mécanismes physiques qui agissent sur la dynamique de la phase dispersée.

9.3.6 Bilan de quantité de mouvement de la phase dispersée

Mise en place

Afin d'analyser quantitativement les mécanismes qui gouvernent la dynamique de la phase dispersée, un bilan de quantité de mouvement est réalisé *a posteriori* en 6 points de la chambre de combustion. Ces "points" sont des petites sphères numérotées de 1 à 6 et positionnées comme sur le schéma de la Fig. 9.55. La position des sphères a été choisie de manière à cibler des zones particulières de l'écoulement diphasique :

1. l'injection de liquide et son entraînement par l'écoulement gazeux ;
2. la zone de recirculation centrale ;
3. la direction principale du spray ;
4. la zone de fort cisaillement en bordure du spray ;
5. la zone de recirculation de coins ;
6. la zone d'impact du spray sur la paroi de la chambre.

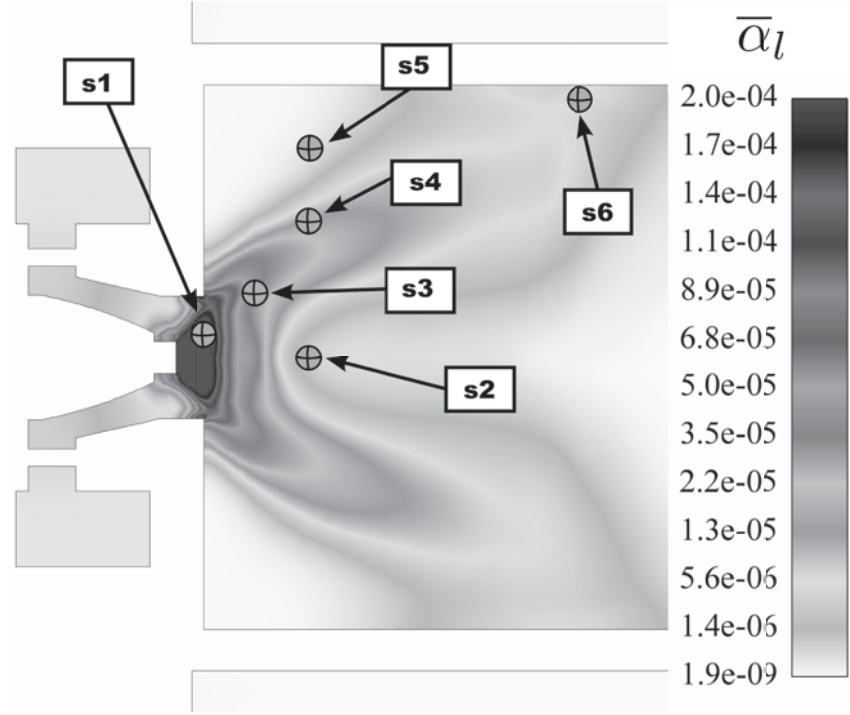


FIG. 9.55: Coupe longitudinale médiane de la chambre MERCATO présentant un champ moyen de fraction volumique (le dégradé est saturé afin de mettre en évidence la zone de spray). Les cercles numérotés représentent la position des sphères dans lesquelles les bilans de quantité de mouvement sont établis.

L'équation de la quantité de mouvement résolue de la phase dispersée s'écrit pour chaque composante i :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{u}_{l,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{u}_{l,i} \hat{u}_{l,j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{\nu}_{RUM} \hat{S}_{l,ij}^* \\
 &- \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{\theta}_l \delta_{ij} \\
 &+ \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_l \bar{\alpha}_l \left(\nu_{l,t}^d \hat{S}_{l,ij}^* - \nu_{l,t}^s \left| \hat{S}_l^* \right| \delta_{ij} \right) \\
 &+ \frac{\rho_l \bar{\alpha}_l}{\bar{\tau}_p} (\tilde{u}_i - \hat{u}_{l,i}) - \bar{\Gamma} \hat{u}_{l,i}
 \end{aligned} \tag{9.22}$$

Afin d'obtenir des quantités représentatives, l'Eq. (9.22) est intégrée sur le volume des sphères. On définit l'opérateur de moyenne sur le volume $\mathcal{V}_s$ de la sphère s :

$$\frac{1}{\mathcal{V}_s} \iiint_{\mathcal{V}_s} \cdot dV \equiv \cdot_{\mathcal{V}_s} \tag{9.23}$$

L'intégration de l'équation Eq. (9.22) fait apparaître 6 contributions à la variation temporelle de quantité de mouvement $\mathcal{Q}_{i,s}$ dans le volume $\mathcal{V}_s$:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \underbrace{\rho_l \bar{\alpha}_l \widehat{u}_{l,i}}_{\mathcal{Q}_{i,s}} \bigg|_{\mathcal{V}_s} &= \left\langle -\frac{\partial}{\partial x_j} \rho_l \bar{\alpha}_l \widehat{u}_{l,i} \widehat{u}_{l,j} \right\rangle_{\mathcal{V}_s} \bigg\} \mathcal{C}_{i,s} \\
 &+ \left\langle \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_l \bar{\alpha}_l \widehat{\nu}_{RUM} \widehat{S}_{l,ij}^* \right\rangle_{\mathcal{V}_s} \bigg\} \mathcal{R}_{i,s} \\
 &+ \left\langle -\frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_l \bar{\alpha}_l \widehat{\theta}_l \delta_{ij} \right\rangle_{\mathcal{V}_s} \bigg\} \mathcal{P}_{i,s} \\
 &+ \left\langle \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_l \bar{\alpha}_l \left(\nu_{l,t}^d \widehat{S}_{l,ij}^* - \nu_{l,t}^s |\widehat{S}_l^*| \delta_{ij} \right) \right\rangle_{\mathcal{V}_s} \bigg\} \mathcal{S}_{i,s} \\
 &+ \underbrace{\left\langle \frac{\rho_l \bar{\alpha}_l}{\bar{\tau}_p} (\widetilde{u}_i - \widehat{u}_{l,i}) \right\rangle_{\mathcal{V}_s}}_{\mathcal{D}_{i,s}} + \underbrace{\langle -\bar{\Gamma} \widehat{u}_{l,i} \rangle_{\mathcal{V}_s}}_{\mathcal{E}_{i,s}}
 \end{aligned} \tag{9.24}$$

Les 6 contributions sont des termes sources ou puits de quantité de mouvement dans les volumes considérés :

- $\mathcal{C}_{i,s}$ est l'apport de quantité de mouvement par l'advection du mouvement *mésoscopique* résolu ;
- $\mathcal{R}_{i,s}$ est le transfert de quantité de mouvement *mésoscopique* résolue vers le mouvement décorrélé ;
- $\mathcal{P}_{i,s}$ est l'effet de pression exercé par l'agitation du mouvement décorrélé ;
- $\mathcal{S}_{i,s}$ est la dissipation turbulente de sous-maille de quantité de mouvement due au mouvement *mésoscopique* non-résolu ;
- $\mathcal{D}_{i,s}$ est le terme source de quantité de mouvement lié à la force de traînée exercée par le gaz porteur ;
- $\mathcal{E}_{i,s}$ est le terme puits correspondant à la quantité de mouvement transmise au gaz par évaporation.

L'intégration est réalisée *a posteriori* sur des solutions instantanées enregistrées environ toutes les 40 μs pendant près de 20 ms. Ainsi le calcul de la variation temporelle d'une solution à l'autre n'est pas aussi précise que dans le code numérique. De plus, les termes de dissipation numérique et le terme source lié à la limitation des valeurs minimales de fraction volumique ne sont pas considérés.

Analyse des résultats

Pour chaque sphère s , les 6 contributions $\mathcal{C}_{i,s}$, $\mathcal{R}_{i,s}$, $\mathcal{P}_{i,s}$, $\mathcal{S}_{i,s}$, $\mathcal{D}_{i,s}$ et $\mathcal{E}_{i,s}$ à la variation de quantité de mouvement ainsi que la dérivée temporelle de la quantité de mouvement $\frac{\partial \mathcal{Q}_{i,s}}{\partial t}$ sont tracées en fonction du temps pour chaque composante i : Figs. 9.56 à 9.61.

Quels que soient les points étudiés, la dissipation turbulente liée au modèle de sous-maille a une influence négligeable sur la dynamique de la phase dispersée devant les autres contributions.

Les variations de quantité de mouvement de la phase dispersée aux points **s1** et **s2** sont très marquées par la présence du PVC identifié au §-9.3.5 à la fréquence 830 Hz. Les taux de variation de quantité de mouvement $\frac{\partial \mathcal{Q}_{i,s}}{\partial t}$ sont déphasés entre les points **s1** et **s2** d'environ $2/3$ de période $T = 1.15 \times 10^{-3}$ s. Ce délai correspond au temps de convection de l'information entre les points **s1** et **s2**. Les variations temporelles de quantité de mouvement sont essentiellement dues aux flux convectifs. Ces flux correspondent certainement à des variations de fraction volumique dans les volumes considérés. Les pics qui apparaissent sur $\frac{\partial \mathcal{Q}_{i,2}}{\partial t}$ Fig. 9.57 sont très nets avec une périodicité à la fréquence du PVC. Les pics de $\frac{\partial \mathcal{Q}_{i,1}}{\partial t}$ Fig. 9.56 également à la période du PVC sont plus larges et montrent des pics secondaires. Ces pics secondaires démontrent que l'activité turbulente plus intense dans la zone d'injection que dans la zone de recirculation centrale, agit sur la dynamique de la phase dispersée.

La seconde contribution aux points d'observation **s1** et **s2** est liée à la traînée. Au point **s1**, pour la composante x , composante ortho-radiale par rapport au mouvement de rotation d'ensemble, $\mathcal{D}_{x,1}$ est un terme source de quantité de mouvement. On note un déphasage entre $\mathcal{C}_{x,1}$ et $\mathcal{D}_{x,1}$ lié à l'inertie des particules. La force de traînée au point **s1** tend à accélérer le mouvement de rotation des gouttes. Les contributions $\mathcal{D}_{y,1}$ et $\mathcal{D}_{z,1}$ changent de signe selon le signe de la vitesse relative $\tilde{u}_i - \hat{u}_{l,i}$ et sont presque en opposition de phase. Au point **s2**, les trois termes de traînée $\mathcal{D}_{i,2}$ suivent un comportement identique, signe que la dynamique est assez isotrope dans cette zone. De plus, les pics sont lisses et bien dessinés. La vitesse de glissement entre les phases fluctue donc moins en **s2** qu'en **s1**, la zone d'analyse **s2** est plus calme que la précédente. Les contributions n'influencent la dynamique que lorsque la variation de quantité de mouvement change de signe, c'est à dire lorsque les composantes $\mathcal{Q}_{i,2}$ sont maximales.

L'influence de l'évaporation sur la dynamique de la phase dispersée aux points **s1** et **s2** est négligeable. L'effet du mouvement décorrélié sur la dynamique de la phase dispersée est d'un ordre de grandeur plus faible comparé à la contribution de la traînée. Au point **s1** le terme de production de mouvement décorrélié est en phase avec la variation de quantité de mouvement, tandis qu'au point **s2**, le mouvement décorrélié, comme la traînée, tend à s'opposer aux variations brusques de quantité de mouvement. Lorsque le volume $\mathcal{V}_1$ voit passer un fort flux de quantité de mouvement, le terme $\mathcal{R}_{i,1}$ positif signifie que les gouttes "s'alignent" au mouvement *mésoscopique*, tandis que lorsque la structure s'éloigne et que le flux de quantité de mouvement diminue, le mouvement des gouttes se décorréle. Au point **s2** lorsque la quantité de mouvement atteint son maximum c'est-à-dire lorsque $\frac{\partial \mathcal{Q}_{i,2}}{\partial t}$

s'annule, le mouvement décorrélé tend à dissiper la quantité de mouvement en dispersant les amas de particules.

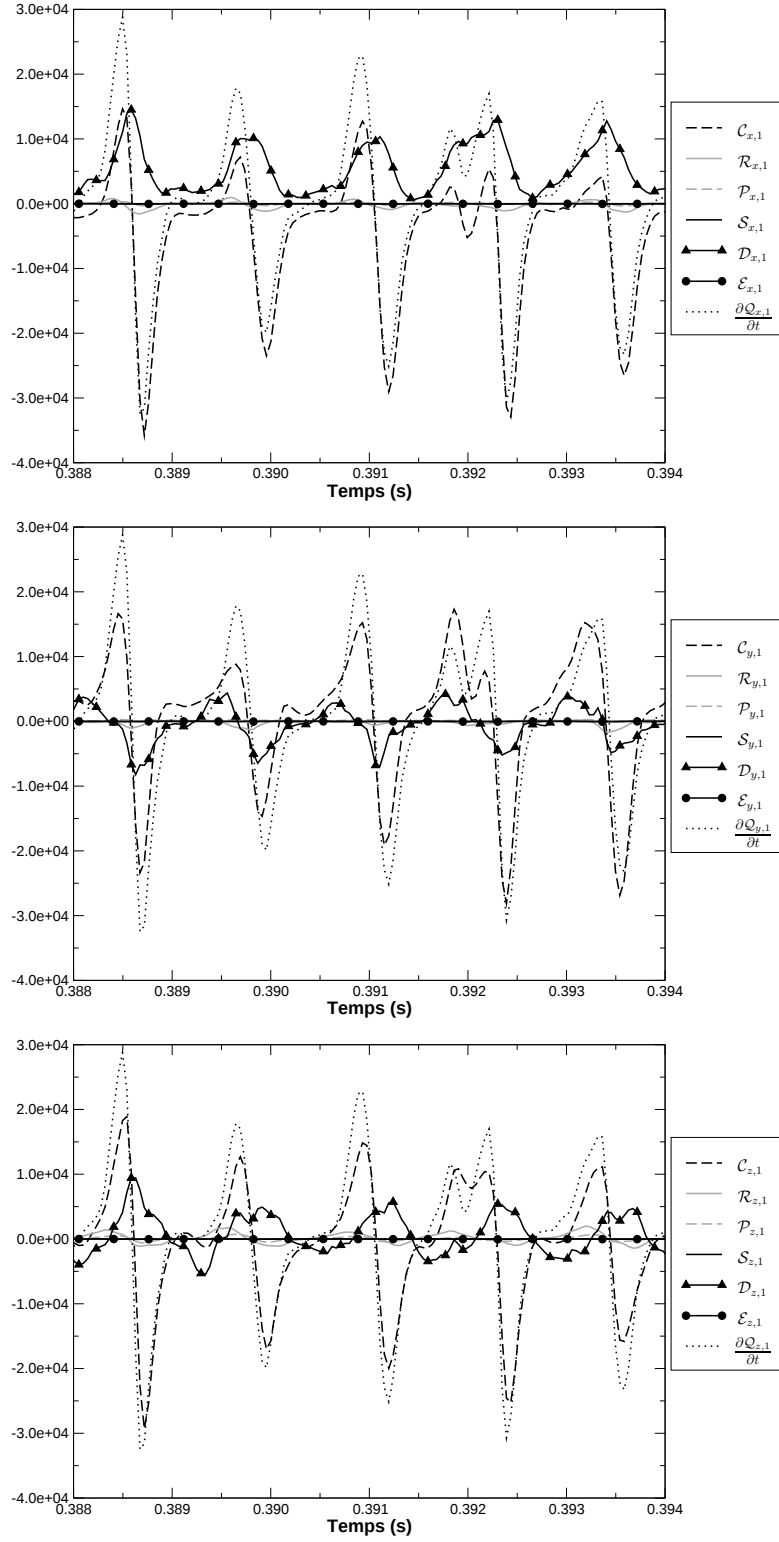


FIG. 9.56: Bilan de quantité de mouvement dans la sphère **s1**. Les 3 composantes x , y , et z sont données de haut en bas. En ordonnées les variations de quantité de mouvement de la phase liquide sont données en $(\text{kg}/\text{m}^2/\text{s}^2)$.

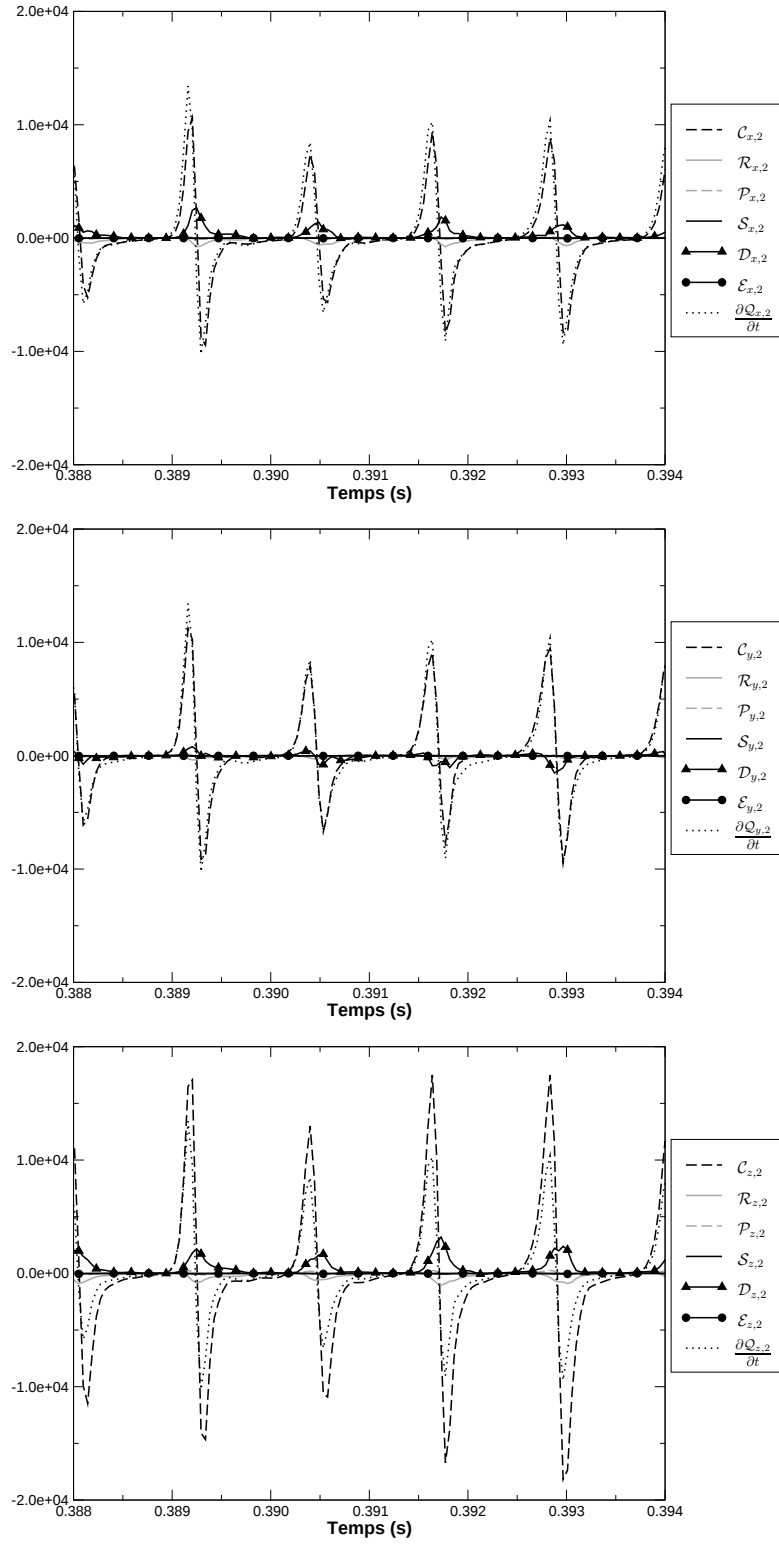


FIG. 9.57: Bilan de quantité de mouvement dans la sphère **s2**. Les 3 composantes x , y , et z sont données de haut en bas. En ordonnées les variations de quantité de mouvement de la phase liquide sont données en $(\text{kg}/\text{m}^2/\text{s}^2)$.

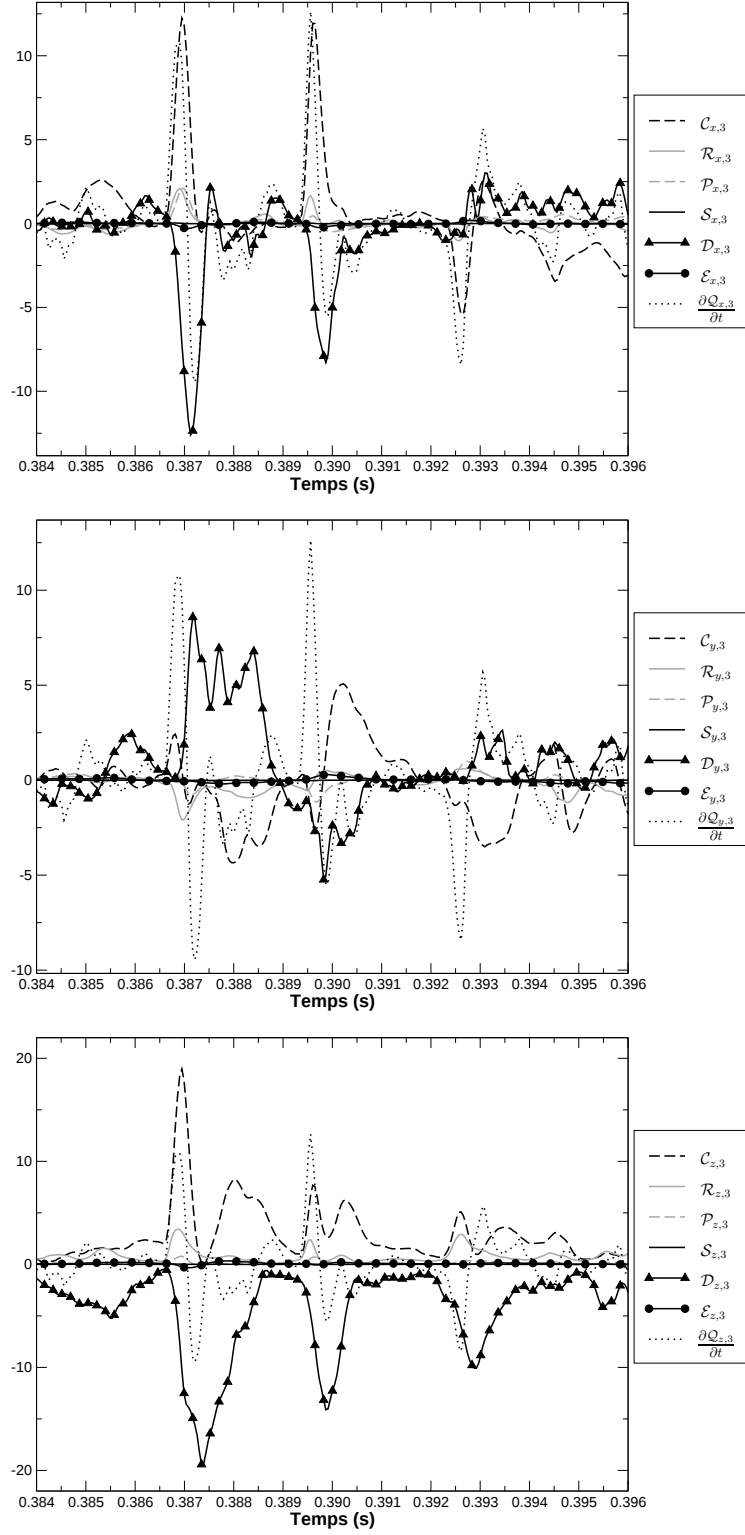


FIG. 9.58: Bilan de quantité de mouvement dans la sphère **s3**. Les 3 composantes x , y , et z sont données de haut en bas. En ordonnées les variations de quantité de mouvement de la phase liquide sont données en $(\text{kg}/\text{m}^2/\text{s}^2)$.

Au point **s3**, la dynamique des gouttes montre des fluctuations basses fréquences (entre 200 et 400 Hz). Les flux convectifs et la force de traînée ont des effets opposés et de même amplitude. La contribution de l'évaporation sur la dynamique est encore une fois négligeable. Le comportement des contributions dues au mouvement décorrélé n'est pas aussi clair que pour les points **s1** et **s2**. Dans cette zone, les effets convectifs et la fraction volumique de liquide sont moindres, les tendances sont donc moins marquées. De plus comme en **s1** les effets turbulents conduisent à l'apparition de variations aléatoires et une fluctuation haute fréquence des termes de traînée $\mathcal{D}_{x,3}$, $\mathcal{D}_{y,3}$.

Au point **s4**, la dynamique des gouttes est encore influencée par le PVC, néanmoins la fréquence 830 Hz qui apparaît n'est pas aussi nette sur les contributions $\mathcal{D}_{i,4}$, $\mathcal{P}_{i,4}$ et $\mathcal{R}_{i,4}$ qu'aux points **s1** et **s2**. L'effet dissipatif du mouvement décorrélé $\mathcal{R}_{i,4}$, du centre du spray vers l'écoulement externe, entraine dans cette zone de cisaillement une augmentation de la quantité de mouvement. Le termes de pression lié à l'énergie décorrélée $\mathcal{P}_{x,4}$ et $\mathcal{P}_{y,4}$ agissent de la même manière que $\mathcal{R}_{x,4}$ et $\mathcal{R}_{y,4}$ alors que $\mathcal{P}_{z,4}$ est négatif et s'oppose à $\mathcal{R}_{z,4}$. Les apports thermiques de la phase gazeuse ayant permis d'atteindre la température T_{wb} , cf. Fig. 9.39, au point **s4**, l'évaporation devient un terme puits dans l'équation bilan quantité de mouvement.

Aux points **s5** et **s6**, la dynamique de la quantité de mouvement de la phase dispersée est très basse fréquence car liée aux mouvements lents de recirculation, et de très faible amplitude. Au point **s5** on observe que les grandeurs sont de très faibles amplitudes, signe que la zone est très calme. Elles sont également très bruitées. Dans la zone de recirculation de coin, le maillage est plutôt grossier, cf. Fig. 9.2, ainsi dans la sphère, dont le rayon est de 2 mm seulement, à peine 1 à 3 noeuds doivent contribuer à l'établissement des statistiques. Néanmoins on constate que l'évaporation et la traînée ont des effets prépondérants mais opposés sur la variation de quantité de mouvement. Au point **s6** d'impact du spray sur la paroi, les effets convectifs sont prépondérants. La contribution $\mathcal{D}_{i,6}$ est du même ordre de grandeur que les variations temporelles de quantité de mouvement. Au cours du temps, $\mathcal{D}_{i,6}$ est parfois de signe opposé, parfois de signe identique à la variation $\frac{\partial \mathcal{Q}_{i,6}}{\partial t}$. Le terme $\mathcal{E}_{i,6}$ a une contribution à peu près constante, négative : par évaporation, la quantité de mouvement diminue. L'évolution des contributions $\mathcal{C}_{i,6}$ et $\frac{\partial \mathcal{Q}_{i,6}}{\partial t}$ montre une quasi-période d'environ 3 ms, soit une fréquence de 325 Hz. Ainsi ces quantités semblent influencées par le mode acoustique quart-d'onde identifié au §-9.3.5.

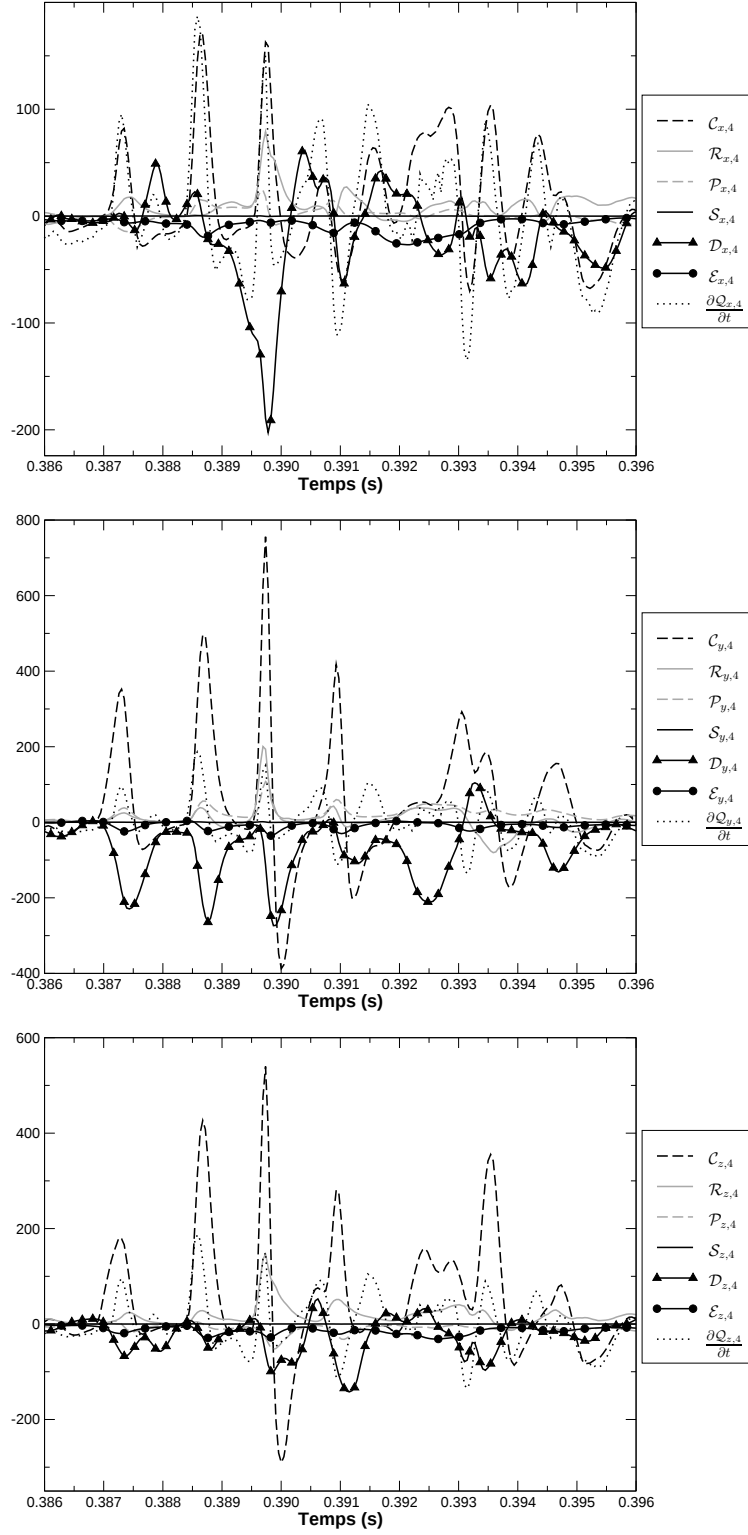


FIG. 9.59: Bilan de quantité de mouvement dans la sphère **s4**. Les 3 composantes x , y , et z sont données de haut en bas. En ordonnées les variations de quantité de mouvement de la phase liquide sont données en $(\text{kg}/\text{m}^2/\text{s}^2)$.

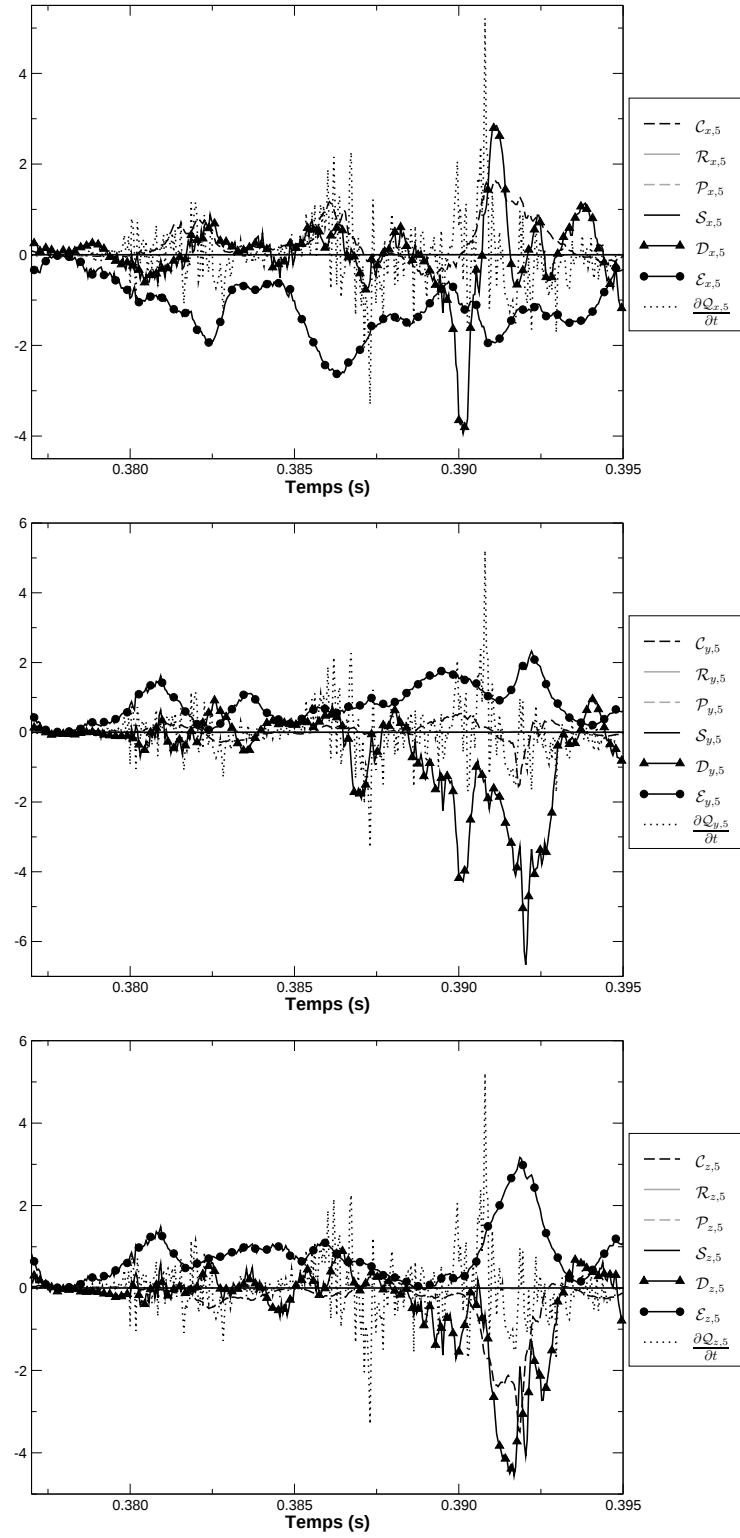


FIG. 9.60: Bilan de quantité de mouvement dans la sphère **s5**. Les 3 composantes x , y , et z sont données de haut en bas. En ordonnées les variations de quantité de mouvement de la phase liquide sont données en $(\text{kg}/\text{m}^2/\text{s}^2)$.

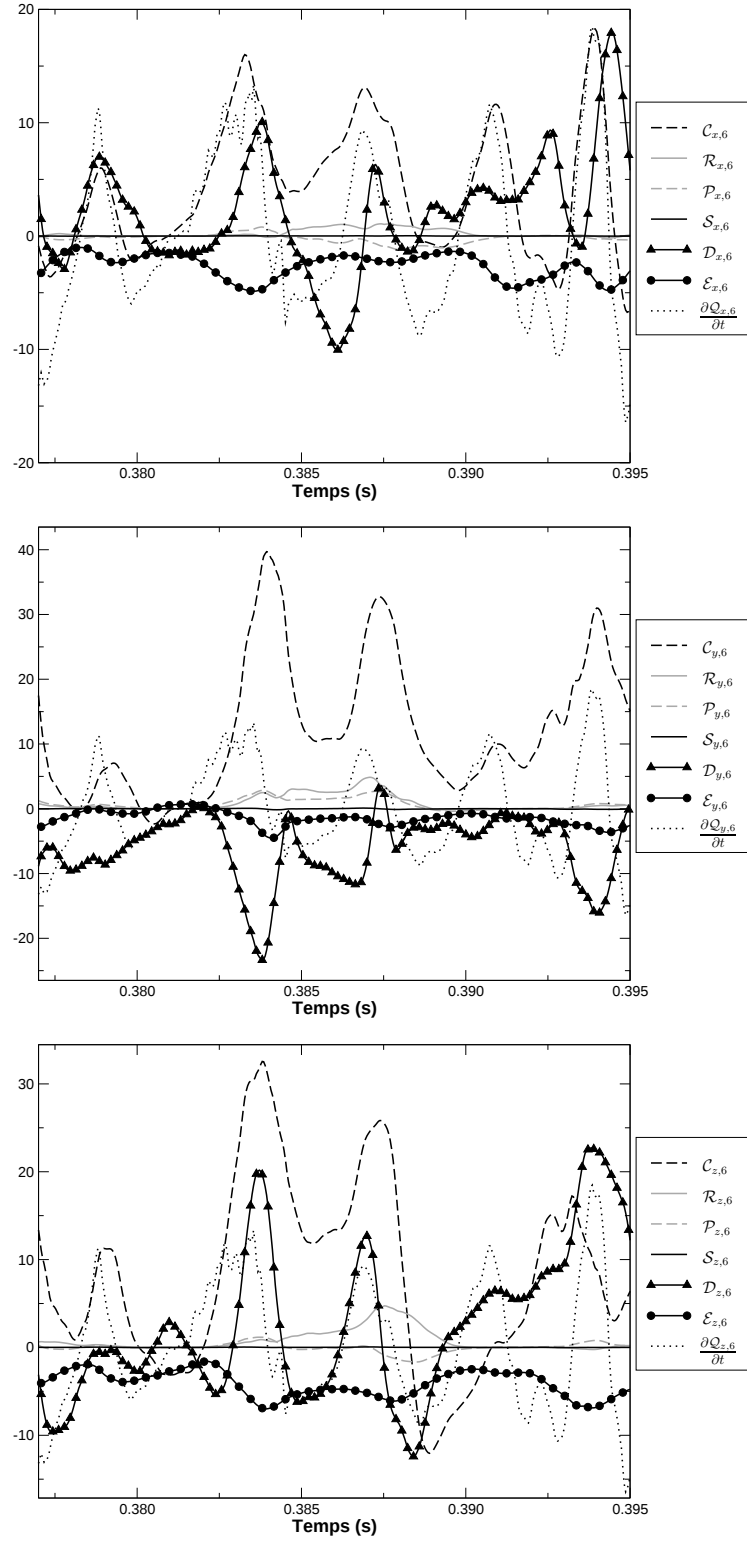


FIG. 9.61: Bilan de quantité de mouvement dans la sphère **s6**. Les 3 composantes x , y , et z sont données de haut en bas. En ordonnées les variations de quantité de mouvement de la phase liquide sont données en $(\text{kg}/\text{m}^2/\text{s}^2)$.

Conclusions

Cette étude a permis d'identifier, en 6 points précis de la chambre MERCATO, les mécanismes prépondérants de la dynamique de la phase dispersée. En terme de variation, on peut classer les points d'observation en fonction de l'ordre de grandeur des amplitudes de variation de quantité de mouvement :

$$\mathbf{s5} \ll \mathbf{s6} \approx \mathbf{s3} \ll \mathbf{s4} \ll \mathbf{s1} \approx \mathbf{s2}$$

Contrairement à ce que l'on pourrait penser, la zone de recirculation centrale **s2**, n'est pas une zone calme comme la zone de recirculation de coins **s5**. Elle voit passer des grandes variations de vitesse et de masse de liquide. D'autre part, les instationnarités sont fortes dans cet écoulement diphasique. Les points **s1**, **s2**, et **s4** sont fortement influencés par la structure instationnaire en précession à 830 Hz identifiée aux Figs. 9.34 et 9.53. Le point d'impact du spray liquide sur la paroi de la chambre (**s6**) est plus sensible à l'effet basse fréquence du mode acoustique quart d'onde identifié à 335 Hz.

Aux points **s1**, **s2**, **s3** et **s4** les effets convectifs sont majoritaires. La force de traînée exercée par le gaz sur les gouttes est la seconde contribution aux variations temporelles de quantité de mouvement de la phase dispersée. La contribution $\mathcal{D}_{i,s}$ vient amortir les variations de quantité de mouvement causées par les flux convectifs. L'évaporation devient une contribution non négligeable lorsque les effets convectifs de la phase dispersée sont faibles, par exemple dans la zone de recirculation de coins au point **s5**. Les contributions du mouvement décorrélé ont un effet secondaire, mais toujours présent (sauf au point **s5**) par rapport à la convection et à la traînée, sur la dynamique des gouttes. Les effets des termes $\mathcal{R}_{i,s}$ et $\mathcal{P}_{i,s}$ sont souvent additifs. Ils conduisent par effet de pression pour $\mathcal{P}_{i,s}$ et par effet visqueux pour $\mathcal{R}_{i,s}$ à redistribuer la quantité de mouvement des zones denses présentant des forts cisaillement aux zones moins agitées. Dans l'ensemble les termes $\mathcal{R}_{i,s}$ et $\mathcal{P}_{i,s}$ s'opposent au terme $\mathcal{D}_{i,s}$: l'agitation décorrélée des gouttes contribue à une redistribution de quantité de mouvement différente de celle imposée par la phase porteuse. Ainsi on comprend que l'agitation liée au mouvement décorrélé des gouttes est essentielle pour capturer les bons niveaux de fluctuations RMS des profils de vitesse liquide, cf. §-9.3.2.

En revanche le terme de dissipation de sous-maille est négligeable devant les autres contributions et ceci en tous les points observés. Les fluctuations de la phase liquide sont essentiellement liées aux grandes structures de l'écoulement. La comparaison des champs instantanés de vitesse liquide et gazeuse (Figs. 9.23 et 9.24) illustre cette observation : la phase liquide montre des structures de large échelle qui sont très bien résolues sur la grille du maillage. La dissipation de l'énergie des gouttes ne se fait pas à petite échelle mais plutôt par redistribution vers le mouvement décorrélé. Certainement dans une approche polydisperse, les fluctuations de vitesse de sous-maille pourraient avoir plus d'importance qu'elles n'en ont ici. Cet aspect sera à regarder en détail dans les prochains calculs Euler-Euler avec une approche *mésoscopique* multi-classe (Vié, 2010).

La viscosité artificielle n'est pas prise en compte dans ces bilans effectués *a posteriori*. Loin d'être négligeable dans les calculs LES diphasique Euler-Euler, elle fait l'objet d'une étude particulière au chapitre suivant au §-10.2.2.

Chapitre 10

Évaluation de la méthode Euler-Euler et des stratégies numériques

Sommaire

10.1 Comparaison des simulations Euler-Euler et Euler-Lagrange . .	236
10.1.1 Paramètres numériques de la simulation Euler-Lagrange	236
10.1.2 Visualisation du spray	237
10.1.3 Comparaison aux mesures expérimentales	239
10.1.4 Analyse du processus d'évaporation	246
10.1.5 Comparaison en termes de temps de calcul	247
10.1.6 Conclusions	248
10.2 Analyse des stratégies numériques pour la simulation Euler-Euler	249
10.2.1 Rappel des différentes stratégies mises en place	249
10.2.2 Comparaisons qualitatives du spray	249
10.2.3 Comparaison aux mesures expérimentales	261
10.2.4 Conservation de la masse	266
10.2.5 Efficacité en temps de calcul	267
10.2.6 Conclusions	267
10.3 Évaluation de la méthodologie FIM-UR	268

Ce chapitre réunit l'ensemble des études comparatives réalisées sur la configuration MERCATO pour évaluer la précision et la robustesse de la méthode Euler-Euler implantée dans AVBP pour une configuration complexe. La première section compare une simulation Euler-Lagrange et une simulation Euler-Euler réalisées toutes deux avec le code AVBP. La deuxième section compare les résultats des différentes stratégies numériques envisagées actuellement pour les simulations Euler-Euler dans AVBP, afin de déterminer, parmi les stratégies présentées et analysées au Chapitre 5, celle qui conduit aux résultats les plus

fiables pour une géométrie complexe. La troisième section compare les résultats obtenus avec la méthodologie FIM-UR pour l'injection à deux débits différents. Cette comparaison permet de cibler les limitations et les futurs développement de la méthode Euler-Euler et du modèle FIM-UR implanté dans AVBP.

10.1 Comparaison des simulations Euler-Euler et Euler-Lagrange

10.1.1 Paramètres numériques de la simulation Euler-Lagrange

Les résultats EL présentés dans cette section sont issus d'une simulation Lagrangienne réalisée par J.-M. Senoner sur la configuration MERCATO, pour le point de fonctionnement correspondant au **Cas II**. Le calcul emploie la version d'AVBP contenant le solveur Lagrangien implanté par García (2009), étendu aux gouttes évaporantes par Jaegle (2009). Les modèles employés pour le couplage avec la phase gazeuse sont strictement équivalents aux modèles présentés au §-3.2.3. Seule l'implantation numérique : les variables caractéristiques de la phase gazeuse sont interpolées à la position de la particule par une méthode des moindres carrés. Les termes sources de couplage inverse pour la phase gazeuse sont obtenus à la cellule par sommation des contributions de chaque particule pondérées par la distance de la particule au centre de la cellule.

La géométrie est indentique à celle des calculs EE, à l'exception de la tête de l'atomiseur qui n'est pas modifiée, (Fig. 7.10). De même, le maillage est créé avec les mêmes paramètres de génération que le maillage présenté au §-9.1.2. Ainsi, même si les points de maillage n'ont pas rigoureusement les mêmes coordonnées, la densité et la taille des cellules sont identiques dans les deux maillages des simulations EE et EL.

Les paramètres numériques employés pour la phase gazeuse sont strictement identiques aux paramètres du calcul TTGC_GAZ, cf. §-9.1. L'injection liquide est réalisée en appliquant la méthodologie FIM-UR pour l'approche Lagrangienne, c'est-à-dire que les profils établis sur l'orifice de sortie de l'atomiseur en $x = x_0$ sont directement appliqués comme condition d'injection de particules. Les paramètres utilisés sont ceux présentés Tab. 9.4. En particulier, le calcul Lagrangien est réalisé avec une injection monodisperse pour comparer avec les calculs Euler-Euler. En pratique, les particules de diamètre $d_{10} = 55 \mu\text{m}$ sont tirées sur une position aléatoire de l'anneau $r_0 \in [R_a, R_0]$ avec la vitesse correspondant aux profils donnés aux Eqs. (7.5-7.7). Les gouttes sont injectées à chaque itération. Leur nombre est ajusté au cours du temps pour s'assurer que le débit injecté corresponde bien au débit cible $m_l = 1 \text{ g/s}$. Au total, lorsque le régime est établi, quelques 360 000 particules sont présentes dans le domaine.

L'avancement temporel des Eqs. (3.1-3.4) est réalisé par une intégration à l'ordre 2. La position initiale des particules est obtenue par un algorithme de tri en arbre¹, puis au

¹L'algorithme pour un domaine tridimensionnel est appelé OCTREE.

cours du calcul, elle est mise à jour par une recherche locale des particules autour de leur position antérieure². Les particules rebondissent sur les parois sans perte d'énergie selon une réflexion spéculaire.

10.1.2 Visualisation du spray

Deux visualisations du spray sont proposées Figs. 10.1 et 10.2. Les zones où les gouttes de la simulation Lagrangienne sont très petites, apparaissent en blanc sur le champ de fraction volumique de liquide car ces gouttes ne représentent quasiment pas de masse. Hormis la zone d'injection³, les deux visualisations sont cohérentes. Le long de la direction principale du spray, on distingue des amas de gouttes, qui se traduisent par un niveau de fraction volumique important sur le champ Eulérien. Ces amas de gouttes, ou zones de concentration préférentielle de gouttes, sont caractéristiques des écoulements dispersés turbulents (Squires & Eaton, 1991).



FIG. 10.1: *EL_JMS* - Visualisation de la distribution de gouttes localisée dans un volume mince autour de la coupe médiane longitudinale. La taille des sphères est proportionnelle au rayon des gouttes qu'elles représentent.

Des champs eulériens instantanés de vitesse axiale et radiale de la phase dispersée sont présentés aux Figs. 10.3 et 10.4. Une comparaison rapide des champs issus de la simulation TTGC_CMS_RUE_1 aux champs interpolés de la simulation EL_JMS permet de constater que les champs des deux approches présentent les mêmes caractéristiques de distribution de vitesse. Les niveaux dans les deux simulations sont identiques pour les deux composantes de vitesse. La faible charge en liquide ne permet pas d'obtenir des champs Eulériens continus interpolés de la représentation Lagrangienne. Sur les champs eulériens reconstruits de la simulation EL_JMS, les zones de forte vitesse axiale sont également des zones de forte vitesse radiale.

²En anglais cet algorithme est appelé *know-vicinity*.

³L'application du modèle FIM-UR ne se fait pas rigoureusement de la même manière dans les deux simulations, cf. Chapitre 7.

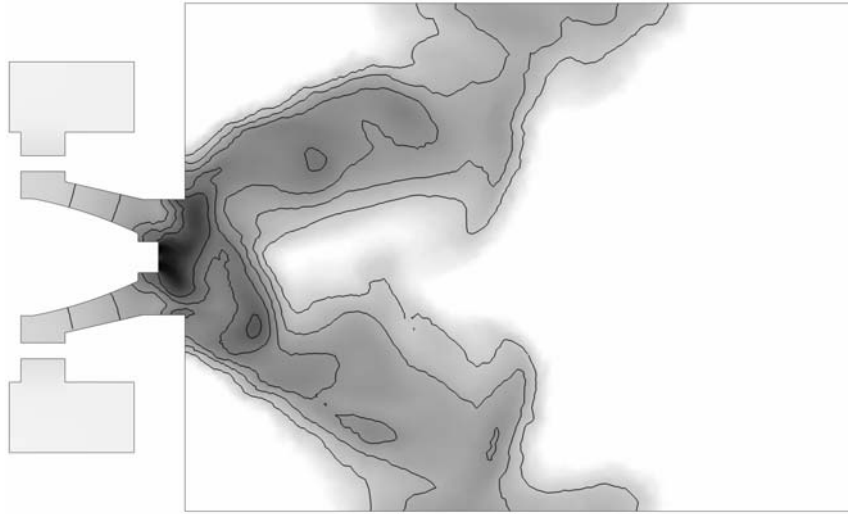


FIG. 10.2: *TTGC_CMS_RUE_1* - Champ de fraction volumique de liquide sur un plan de coupe médiane longitudinale.

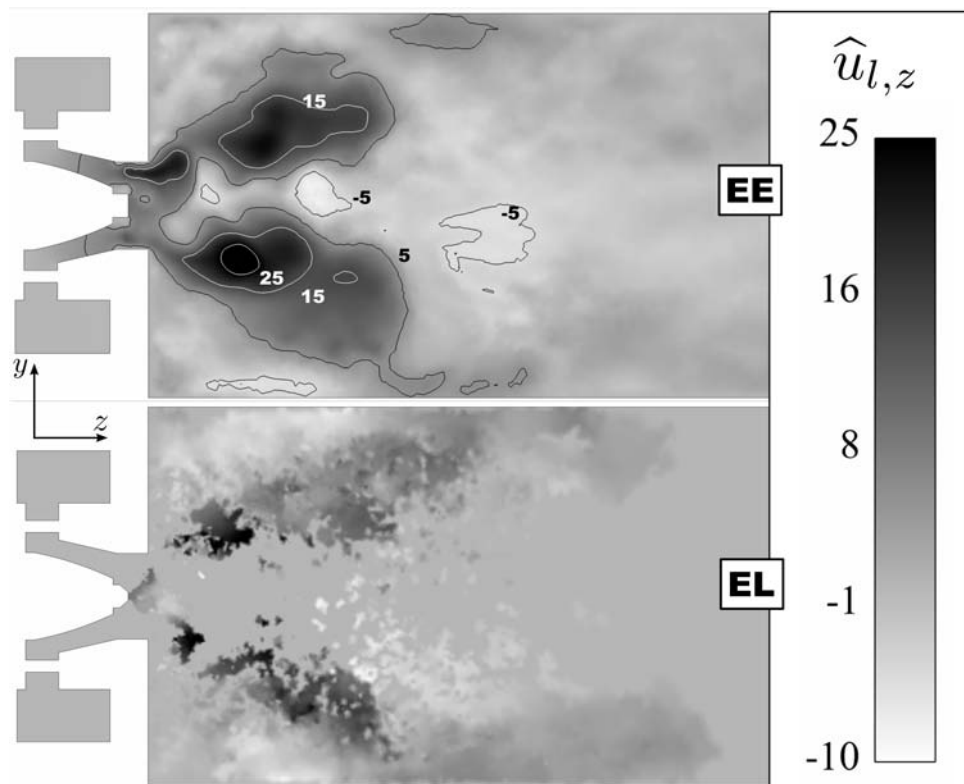


FIG. 10.3: Comparaison des champs eulériens de vitesse axiale (en m/s) des simulations *TTGC_CMS_RUE_1* (haut) et *EL_JMS* (bas).

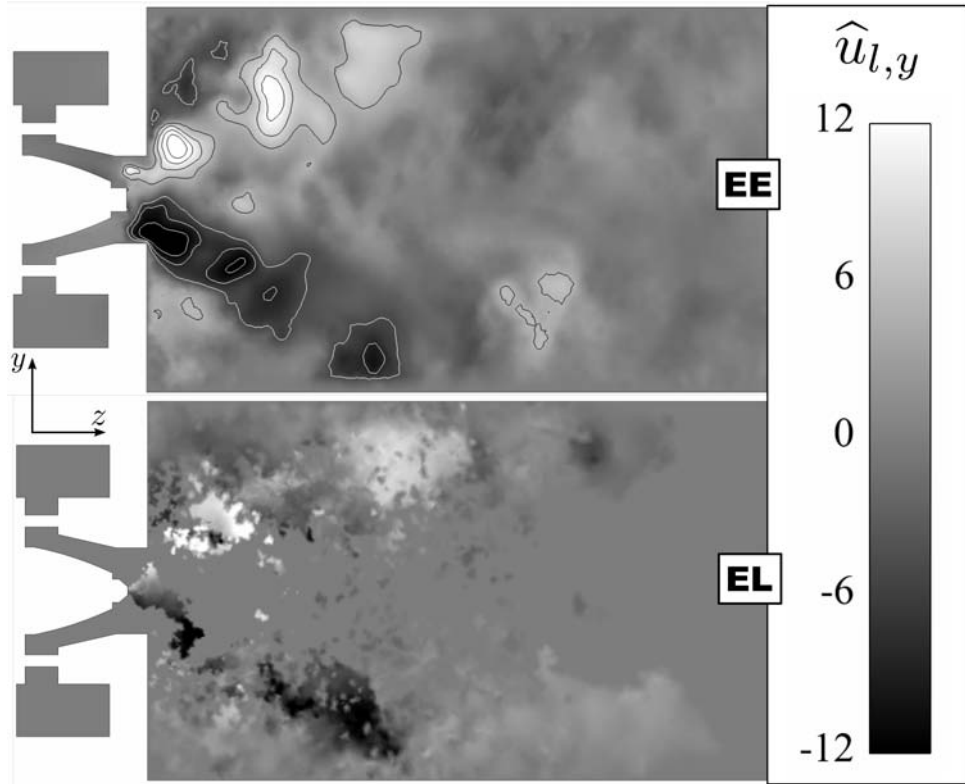


FIG. 10.4: Comparaison des champs eulériens de vitesse radiale (en m/s) des simulations TTGC_CMS_RUE.1 (haut) et EL_JMS (bas).

10.1.3 Comparaison aux mesures expérimentales

Les résultats de la simulation EL, dont la méthodologie a été brièvement présentée au §-10.1.1 et identifiée dans la suite EL_JMS, sont comparés aux résultats de la simulation EE TTGC_CMS_RUE.1. Dans un premier temps, on s'est assuré que la dynamique de la phase gazeuse résolue est rigoureusement identique entre les deux versions d'AVBP employées. Pour la comparaison des profils de vitesse liquide, les mesures expérimentales déjà employées pour les comparaisons au §-9.3.2 sont utilisées ici comme référence. Les statistiques des deux simulations sont réalisées sur plus de 200 ms de temps physique, soit une dizaine de temps convectif τ_{conv} (Eq. (9.2)).

Vitesse liquide moyenne

Les profils de vitesse moyenne sont présentés aux Figs. 10.5 à 10.7. Les statistiques des deux simulations EL_JMS et TTGC_CMS_RUE.1 sont très similaires pour les trois composantes avec un niveau de précision comparable.

Pour la composante axiale de la simulation EL_JMS, la vitesse est légèrement sous-

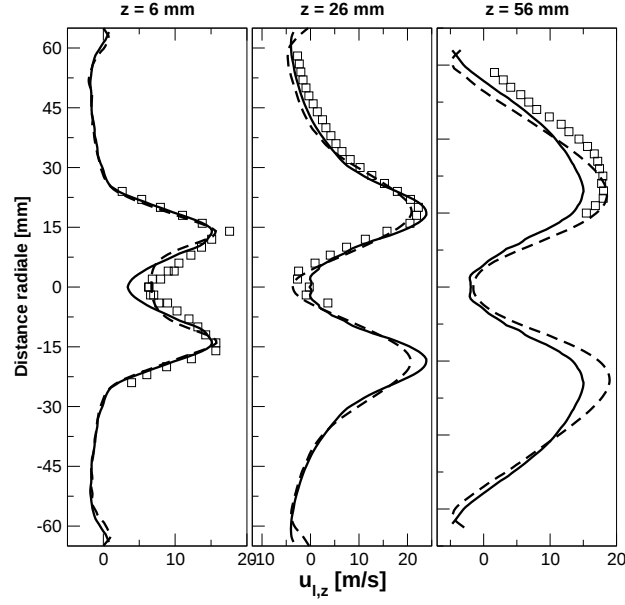


FIG. 10.5: **Cas II** - Profils de vitesse liquide moyenne axiale en m/s. Symboles : LDA ; lignes : simulations AVBP - pleine : EL-JMS, pointillée : TTGC-CMS_RUE.1.

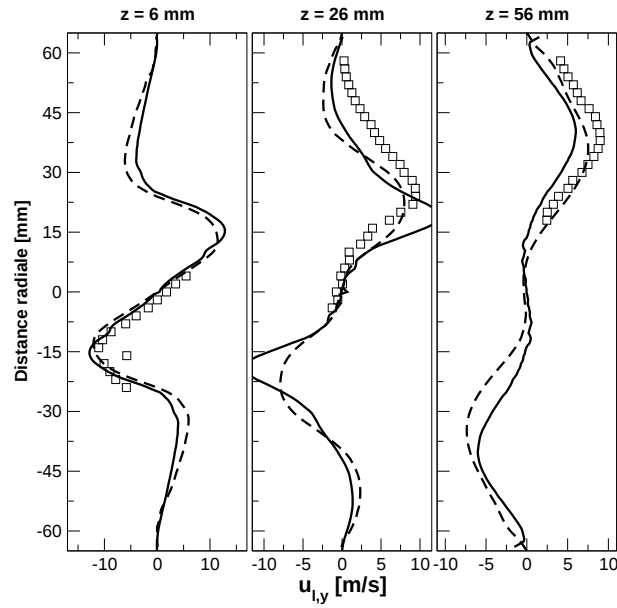


FIG. 10.6: **Cas II** - Profils de vitesse liquide moyenne radiale en m/s. Symboles : LDA ; lignes : simulations AVBP - pleine : EL-JMS, pointillée : TTGC-CMS_RUE.1.

estimée au centre à $z = 6$ mm puis surestimée à $z = 26$ mm. Cette différence pourrait être liée à un biais des statistiques du fait du très faible nombre de particules au centre de la chambre de combustion. A $z = 56$ mm, les pics sont placés légèrement plus vers l'extérieur et leur amplitude est plus faible que dans la simulation EE.

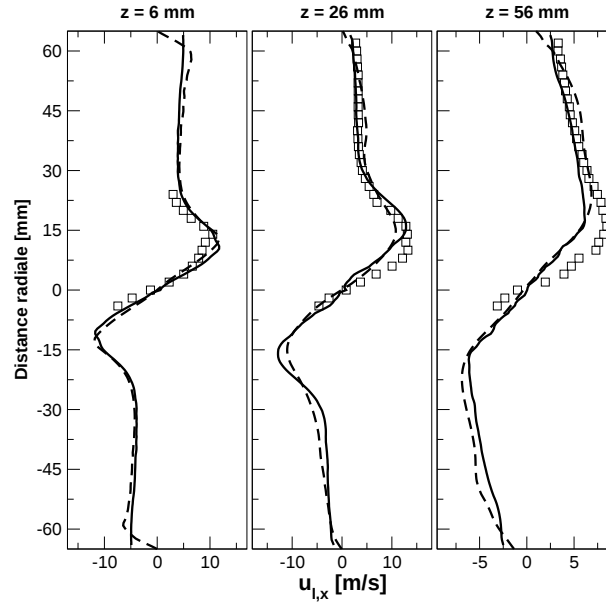


FIG. 10.7: **Cas II** - Profils de vitesse liquide moyenne ortho-radiale en m/s. Symboles : LDA ; lignes : simulations AVBP - pleine : EL_JMS, pointillée : TTGC_CMS_RUE_1.

Concernant les deux autres composantes, il y a également un bon accord entre les deux approches. A $z = 56$ mm l'amplitude des de la simulation EL_JMS est toujours sous-estimée par rapport à la simulation TTGC_CMS_RUE_1. On note toutefois une forte différence pour la composante radiale à $z = 26$ mm où la simulation EL_JMS sur-prédit fortement les pics de vitesse.

Pour les trois composantes, la position radiale des *maxima* est mieux prédite à 56 mm avec la simulation EL_JMS qu'avec la simulation TTGC_CMS_RUE_1, néanmoins les niveaux sont souvent sous-estimés.

Fluctuations de vitesse liquide

Les profils d'écart-type, ou fluctuations RMS, de vitesse liquide sont présentés Figs. 10.8 à 10.10. A nouveau, les statistiques issues des deux approches sont extrêmement proches et apportent le même niveau de précision. Les statistiques de la simulation EL souffrent d'un manque de convergence notable au centre des profils, à cause de la très faible densité de gouttes dans la zone de recirculation centrale. De manière générale, la forme des profils obtenus par la simulation EL_JMS est plus proche des profils expérimentaux. En particulier, les fluctuations sur l'extérieur du spray, par exemple sur la composante ortho-radiale à 26 et 56 mm, sont bien mieux estimées dans la simulation EL_JMS que dans la simulation Eulérienne TTGC_CMS_RUE_1.

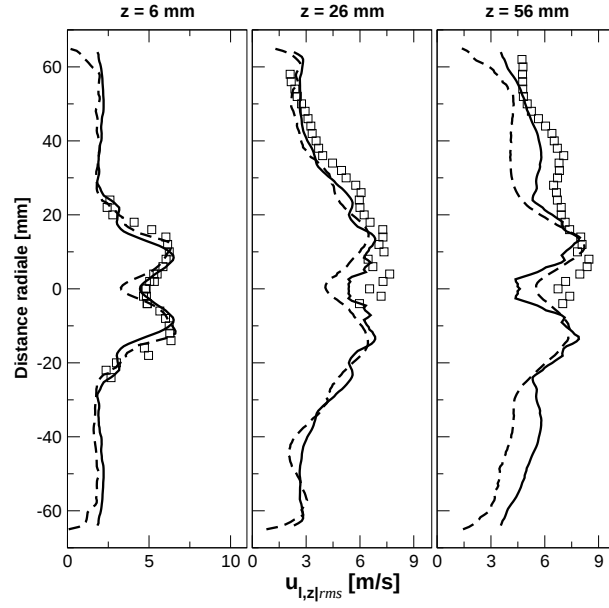


FIG. 10.8: **Cas II** - Profils de fluctuations RMS de vitesse liquide axiale en m/s. Symboles : LDA ; lignes : simulations AVBP - pleine : EL-JMS, pointillée : TTGC-CMS_RUE.1.

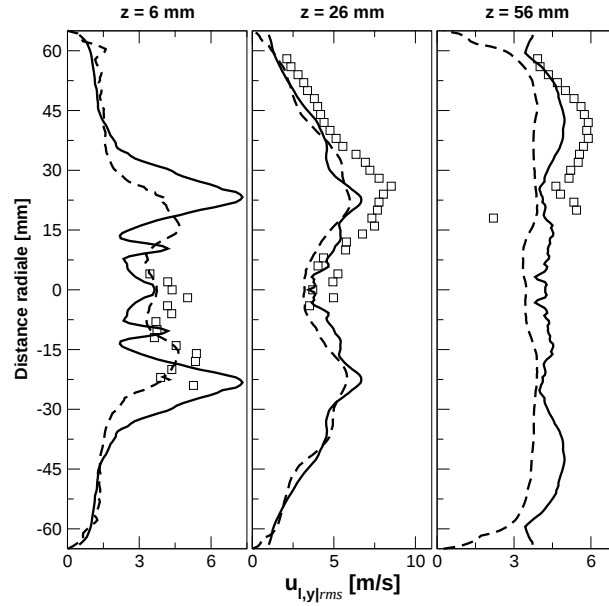


FIG. 10.9: **Cas II** - Profils de fluctuations RMS de vitesse liquide radiale en m/s. Symboles : LDA ; lignes : simulations AVBP - pleine : EL-JMS, pointillée : TTGC-CMS_RUE.1.

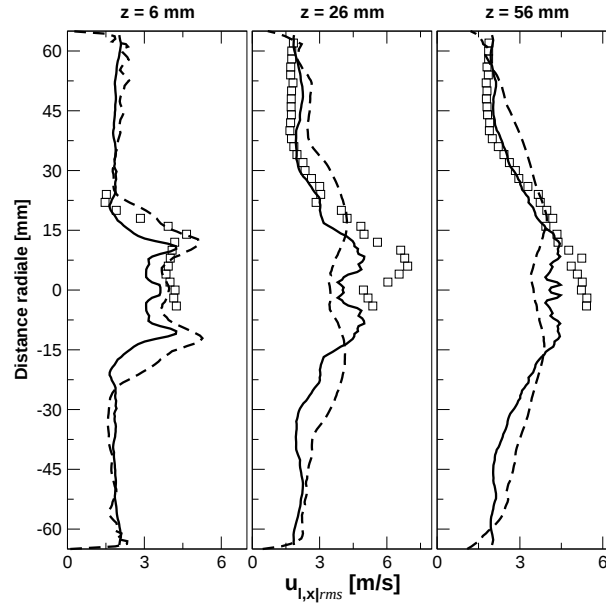


FIG. 10.10: **Cas II** - Profils de fluctuations RMS de vitesse liquide ortho-radiale en m/s. Symboles : LDA ; lignes : simulations AVBP - pleine : EL_JMS, pointillée : TTGC_CMS_RUE_1.

Diamètre de gouttes

Là encore, les profils de diamètres moyens issus de la simulations EL_JMS ont les mêmes caractéristiques que les profils Eulériens : le profil plat à 6 mm, issu de l'injection monodisperse, évolue en un profil à deux bosses qui s'étalent ensuite vers l'extérieur du spray.

Dès $z = 26$ mm, la simulation EL a rempli les coins de la chambre de gouttes de diamètre $20\ \mu\text{m}$, alors que dans la simulation EE ces coins sont toujours vides de gouttes, puisqu'en effet, les niveaux de diamètre dans ces coins correspondent aux valeurs seuils (Eq. (9.13)). Dans la suite les pics des profils de la simulation EL_JMS sont plus étalés vers l'extérieur, c'est-à-dire que les gouttes de taille plus importante continuent de migrer vers les bords du spray.

Dans le calcul TTGC_CMS_RUE_1, il semble que les gouttes qui entrent dans la zone de recirculation de coins soient piégées et qu'elles y restent jusqu'à ce qu'elles se soient entièrement évaporées. Dans la simulation EL_JMS, il existe un mécanisme de dispersion qui permet aux gouttes de sortir de la zone de recirculation de coins. Cette différence de comportement est probablement liée au traitement différent de l'impact des gouttes à la paroi. Dans la simulation TTGC_CMS_RUE_1, lorsqu'un front de gouttes atteint la paroi, il y reste "collé" et est convecté uniquement parallèlement à la paroi par le glissement sur les paroi non-adhérente pour le liquide (ligne noire fléchée Fig. 10.12). En revanche, dans la simulation EL_JMS, le rebond des particules (flèches grises Fig. 10.12) permet au contraire de renvoyer les particules dans l'écoulement et de redistribuer les diamètres et l'agitation

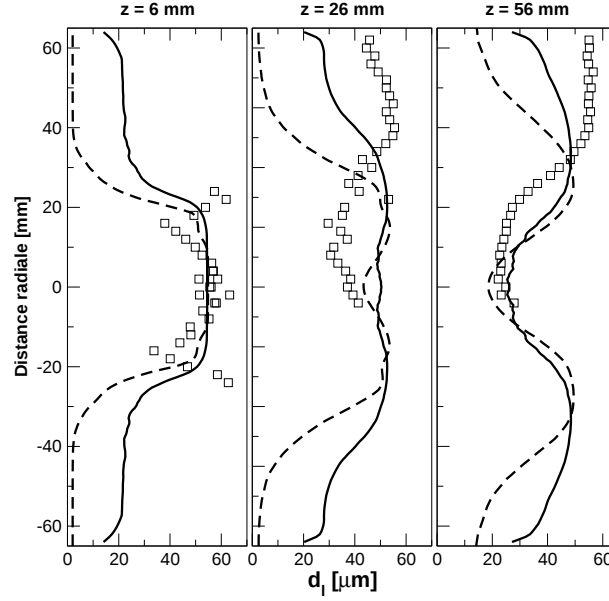


FIG. 10.11: **Cas II** - Profils de diamètre moyen en μm . Symboles : PDA ; lignes : simulations AVBP - pleine : EL_JMS, pointillée : TTGC_CMS_RUE_1.

dans le coin de la chambre. Les rebonds de gouttes aux parois sont certainement une source de mouvement décorrélié qui n'est actuellement pas prise en compte dans l'approche Euler-Euler *mésoscopique* actuellement implantée dans AVBP.

Une autre contribution à la distribution de diamètre moyen dans les coins de la chambre est certainement liée à la résolution de la polydispersion locale. En effet, les calculs antérieurs EL réalisés avec une injection polydisperse (Senoner *et al.*, 2009b) capturaient la bonne répartition du diamètre moyen sur l'extérieur du spray. Dans le cas du brûleur TLC, Jaegle (2009) a montré qu'un calcul EL avec une injection monodisperse résoud naturellement une polydispersion locale issue de l'histoire propre de chaque particule. Ainsi la distribution de diamètre à l'extérieur du spray obtenue par le simulation EL_JMS correspond peut-être un effet de polydispersion que ne peut pas résoudre la simulation EE monodisperse.

La différence des diamètres moyens à l'extérieur du spray entre les deux approches permet d'identifier une cause prépondérante dans les différences observées précédemment sur les fluctuations de vitesse liquide. En effet, la taille des gouttes modifie leur sensibilité aux échelles de la turbulence.

Les niveaux des fluctuations de diamètre, des profils présentés Fig. 10.13, sont légèrement plus élevés dans l'approche Lagrangienne. En effet même si l'injection des gouttes est monodisperse, l'évaporation fait évoluer le diamètre des gouttes selon leur trajectoire propre et le calcul Lagrangien devient peu à peu localement polydisperse, ce qui n'est pas possible en Eulérien. Néanmoins les niveaux de fluctuations de diamètre issus de la simulation EL_JMS restent très en-dessous des niveaux mesurés dans l'expérience. Cette

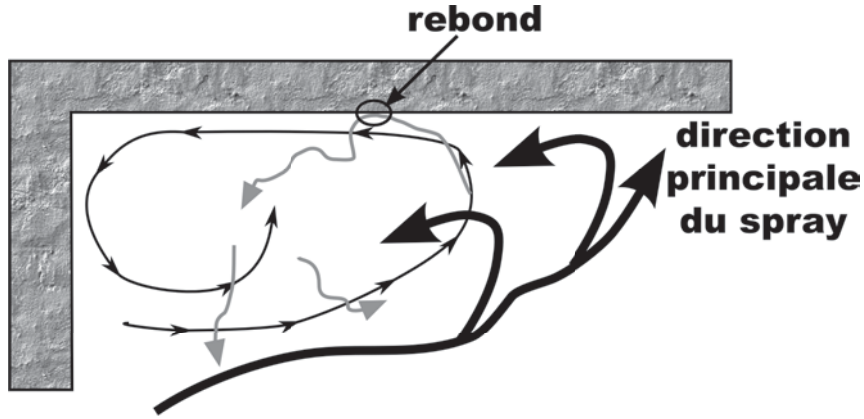
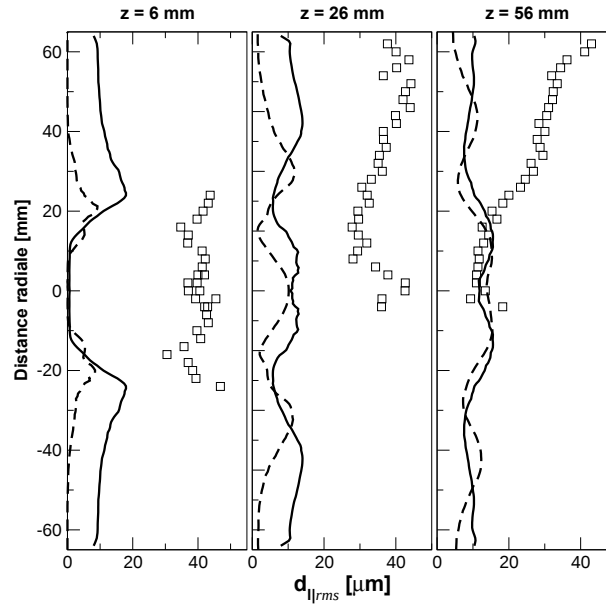


FIG. 10.12: Schématisation du mécanisme de dispersion des gouttes dans les coins.

FIG. 10.13: **Cas II** - Profils d'écart-type de diamètre moyen. Symboles : PDA ; lignes : simulations AVBP - pleine : EL_JMS, pointillée : TTGC_CMS_RUE_1.

observation permet de conclure que la polydispersion locale mesurée sur le banc MERCATO, correspond à deux contributions : l'une due au processus d'évaporation le long de chaque trajectoire de goutte, et l'autre liée directement à la polydispersion du spray produit par l'atomiseur. Cette dernière n'est pas prise en compte dans les simulations et s'avère prépondérante. Les comparaisons entre un calcul EL monodisperse et EL polydispense permettront de conclure sur cette observation (Jaegle, 2009; Senoner, 2010). Néanmoins la polydispersion dans cette configuration n'a pas un effet prépondérant sur les profils de vitesse qui sont malgré tout relativement bien captés par les deux simulations. La dynamique est bien reproduite par la classe moyenne des gouttes.

10.1.4 Analyse du processus d'évaporation

Comme présenté au Chapitre 1, l'objectif des simulations diphasiques réalisées sous AVBP n'est pas seulement de prédire précisément la dynamique des phases gazeuse et dispersée mais aussi de renseigner sur la répartition du carburant dans le foyer afin de mieux appréhender les modes de combustion.

Le kérosène injecté sous forme liquide puis évaporé n'est pas consommé par combustion. Ainsi, la richesse gazeuse moyenne dans la chambre augmente progressivement au cours du calcul. La moyenne calculée sur le volume de la chambre $\tilde{\Phi}_g \nu_{\text{merc}}$ est tracée Fig. 10.14 en fonction du temps physique. Le temps est remis à zéro pour les deux extraits analysés des simulations EL_CMS et TTGC_CMS_RUE.1.

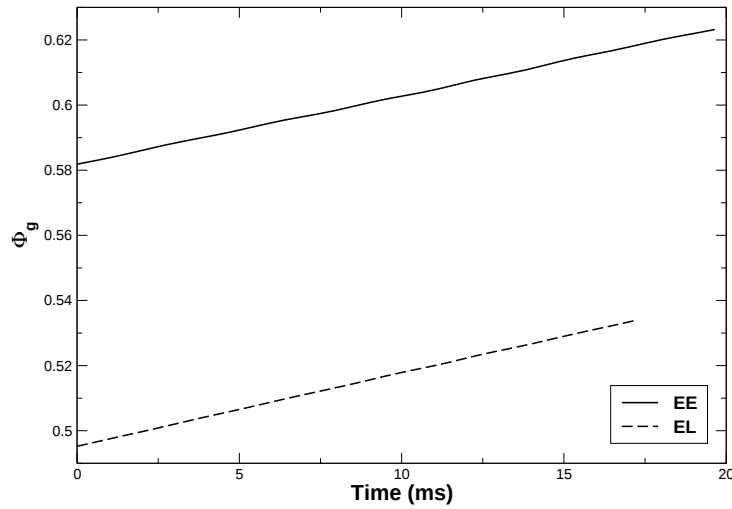


FIG. 10.14: Evolution de la richesse moyenne dans la chambre MERCATO, notée $\tilde{\Phi}_g \nu_{\text{merc}}$.

La richesse dans les deux simulations augmente linéairement et avec la même vitesse. Cette observation atteste que les modèles d'évaporation et les débits liquide injectés dans les simulations sont identiques. Néanmoins les deux extraits analysés des simulations EE et EL ne correspondent pas au même avancement dans le temps.

Pour comparer directement des champs instantanés de fraction massique de carburant vapeur, la valeur moyenne dans la chambre à l'instant d'observation $\tilde{Y}_F \nu_{\text{merc}}$ est retranchée à la valeur locale instantanée $\tilde{Y}_F$. La grandeur tracée Fig. 10.15 est donc l'écart de la fraction massique à la moyenne noté $\delta Y_F = \tilde{Y}_F - \tilde{Y}_F \nu_{\text{merc}}$. La répartition du carburant dans la chambre est similaire pour les deux simulations. Le carburant produit par l'évaporation proche injection, est convecté vers la sortie de la chambre. En revanche, le carburant produit dans les zones de recirculation de coins reste piégé dans la zone de recirculation de coins, où les *maxima* de δY_F sont atteints. Le carburant formé dans les coins est également convecté en partie vers l'aval de la chambre par l'écoulement lent (derrière l'ouverture de la zone de recirculation) le long des parois. Les différences observées entre les approches EE et EL au niveau des profils de diamètres, présentés à la Fig. 10.11, ne se répercutent

pas de manière notable sur les champs de répartition de fraction massique de carburant. Néanmoins il faudrait vérifier cette observation en confrontant ces champs à des mesures expérimentales. Malheureusement, la répartition du carburant dans la chambre n'a pas été mesurée sur le banc MERCATO, la mesure de fraction massique étant délicate dans une telle configuration présentant un écoulement vrillé.

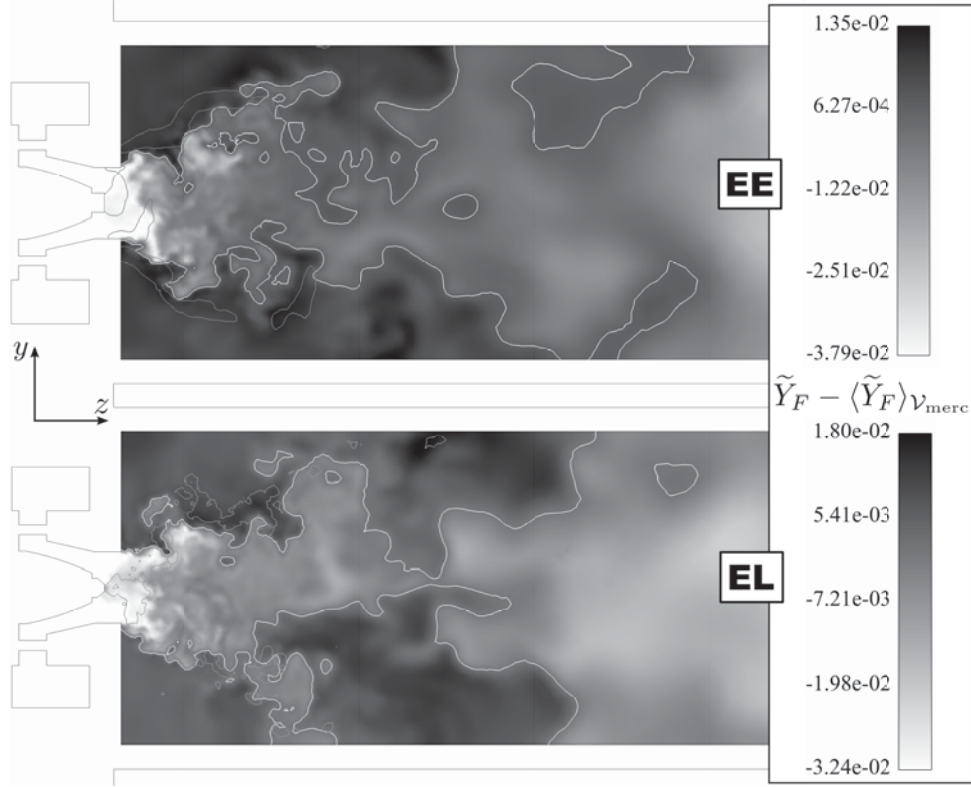


FIG. 10.15: Champs instantanés de l'écart de fraction massique à la moyenne dans la chambre : $\delta Y_F = \tilde{Y}_F - \langle \tilde{Y}_F \rangle_{V_{\text{merc}}}$. La ligne blanche correspond au niveau de fraction massique moyen, c'est-à-dire à $\delta Y_F = 0$. Les lignes grises matérialisent les iso-contours de taux d'évaporation $\bar{\Gamma} = 1.5 \text{ kg/m}^3/\text{s}$.

10.1.5 Comparaison en termes de temps de calcul

Les calculs réalisés au cours de cette thèse ont bénéficié de l'excellent parallélisme d'AVBP, et d'un accès à différentes machines de calcul propres au CERFACS ou à l'extérieur dans des centres calculs intensifs (SGI ALTIX ICE du CINES, BULL-Itanium du CCRT, ROCKS+MOAB de l'université de Stanford⁴, et BlueGene/P du laboratoire national d'Argonne⁵). Le portage d'un code de calcul sur différentes architectures est une tâche délicate et difficile, réalisée par Gabriel Staffelbach pour AVBP.

Les calculs présentés dans ce manuscrit ont tous été tournés (en partie) sur la machine

⁴Dans le cadre du *Summer Program 2008*.

⁵Dans le cadre du projet INCITE.

BlueGene/P Intrepid du centre national d'Argonne, afin de pouvoir établir une mesure comparable de l'efficacité réduite des différentes stratégies mises en place. L'efficacité correspond au temps de calcul nécessaire pour effectuer une itération du calcul par noeud du maillage et par nombre de processeurs n_{proc} . L'efficacité réduite est ce temps rapporté sur un seul processeur. Le nombre de noeuds du maillage utilisé pour la configuration MERCATO est $N_{\text{node}} = 649\,282$ pour les simulations Euler-Euler et $N_{\text{node}} = 727\,032$ pour la simulation Euler-Lagrange.

$$E(n_{\text{proc}}) = \frac{T_{\text{CPU}}(n_{\text{proc}})}{n_{\text{iter}} \cdot N_{\text{node}}} \quad (10.1)$$

$$RE = \frac{T_{\text{CPU}}(n_{\text{proc}}) \cdot n_{\text{proc}}}{n_{\text{iter}} \cdot N_{\text{node}}} \quad (10.2)$$

où $T_{\text{CPU}}(n_{\text{proc}})$ est la durée du calcul porté sur n_{proc} processeurs.

Simulation	Temps CPU par processeur (s)	n_{iter}	n_{proc}	E (s/it/no/proc)	RE (s/it/no)
EL_JMS	11785.47	15000	1024	1.08×10^{-6}	1.11×10^{-3}
TTGC_CMS_RUE_1	42305.93	92000	1024	7.08×10^{-7}	7.25×10^{-4}

TAB. 10.1: Temps de calcul et efficacité

On constate que sur cette configuration la simulation Euler-Euler est plus efficace que la simulation Euler-Lagrange. Néanmoins ce constat n'est pas toujours vrai. Les simulations réalisées sur le cluster Bluegene/L du CERFACS (Senoner *et al.*, 2009b) ne montrent pas la même tendance. Si le calcul Euler-Euler conduit à la même efficacité, le calcul Lagrangien présenté alors était bien plus efficace. Cette différence peut avoir plusieurs causes. Le calcul publié (Senoner *et al.*, 2009b) était polydisperse et à l'état stationnaire le domaine comptait quelques 250 000 particules contre 360 000 dans le calcul présenté dans ce manuscrit. D'autre part, les parois ne traitaient pas le rebond des particules qui nécessite l'emploi d'un algorithme coûteux de localisation des particules. Ces deux causes permettent de comprendre pourquoi la simulation monodisperse présentée dans ce manuscrit est moins efficace.

L'efficacité en temps de calcul des simulations Euler-Euler n'est pas liée à la charge contrairement aux simulation Euler-Lagrange. La méthode Euler-Euler est donc particulièrement bien adaptée à la simulation parallèle, son coût est indépendant du débit imposé.

10.1.6 Conclusions

L'utilisation du modèle d'injection monodisperse FIM-UR dans la simulation EL_JMS et TTGC_CMS_RUE_1 permet d'obtenir des conditions limites adaptées pour chaque approche et cohérentes : elles conduisent à des statistiques tout à fait comparables.

Des différences apparaissent dans les profils de répartition de taille de goutte, certainement lié au traitement différent pour les parois de la chambre dans les deux approches et

à la polydispersion qui apparaît naturellement dans l'approche EL. Ces différences ne se répercutent pas sur la distribution de carburant gazeux dans la chambre.

La méthode Euler-Lagrange, plus intuitive est souvent préférée. Néanmoins la méthode Euler-Euler *mésoscopique* est tout à fait adaptée pour la simulation d'écoulements diphasiques dans les chambres de combustion à carburant liquide. La précision des deux approches est similaires. Il reste à évaluer la fiabilité de la stratégie numérique employée pour la méthode Euler-Euler et à évaluer la méthode d'injection FIM-UR.

10.2 Analyse des stratégies numériques pour la simulation Euler-Euler

10.2.1 Rappel des différentes stratégies mises en place

Dans cette section, les résultats des simulations Euler-Euler réalisées sur le **Cas II** de la configuration MERCATO avec les 3 stratégies rappelées au Tab. 10.2, sont analysés qualitativement et quantitativement.

Nomenclature	Schéma gaz	Stratégie liquide	Senseur de VA	$\epsilon^{(2)}$
LW_PSI_noRUE_1	LW	PSI_AV_3	CMS	0.04
TTGC_CMS_noRUE_1	TTGC	TTGC_AV_3	CMS	0.25
TTGC_CMS_RUE_1	TTGC	TTGC_RUE_AV_4	CMS_lite	0.30

TAB. 10.2: *Simulations dont les résultats sont présentés dans cette section.*

Pour chaque simulation, les statistiques ont été enregistrées sur 200 ms de temps physique. Les comparaisons aux mesures expérimentales sont montrées au paragraphe §-10.2.3. Pour avoir un aperçu global des performances des stratégies évaluées une première analyse qualitative est d'abord réalisée au paragraphe suivant.

10.2.2 Comparaisons qualitatives du spray

Distribution des gouttes

La répartition de gouttes est montrée Fig. 10.16 sur un cliché instantané pour chaque stratégie. Les zones les plus denses apparaissent à l'injection, puis dès que le spray entre dans la chambre, les gouttes sont dispersées dans la zone de *vortex breakdown* de l'écoulement gazeux. Des amas de gouttes importants apparaissent également sur l'extérieur du jet vrillé. Les niveaux les plus élevés apparaissent dans les simulations LW_PSI_noRUE_1 et TTGC_CMS_RUE_1. La simulation LW_PSI_noRUE_1 montre un cône de répartition de densité volumique moins ouvert que les deux autres simulations réalisées avec le schéma

TTGC. Le champ issu de la simulation TTGC_CMS_noRUE_1 apparaît très lissé par la dissipation artificielle importante⁶ et le champ issu de la simulation TTGC_CMS_RUE_1 montre des lignes de niveau assez bruitées identifiant des effets de dispersion mal contrôlés.

La ségrégation de gouttelettes dans le spray est une quantité statistique définie comme le ratio $\bar{n}_l^2 / \bar{n}_l^2$ où $\cdot$ est l'opérateur de moyenne temporelle définie au §-8.2.4. Une valeur plus grande que 1 identifie une zone où les effets de compressibilité sur la phase dispersée sont importants, c'est-à-dire où les écarts à la densité moyenne sont fréquents et importants. Les champs de ségrégation pour chaque simulation sont présentés Fig. 10.17. Les champs montrent une forme comparable pour les 3 simulations.

Les niveaux de ségrégation les plus forts apparaissent dans la zone centrale où la densité volumique de goutte est faible. Dans ces zones des forts amas de gouttes passent régulièrement. L'étude de la dynamique locale de la phase dispersée réalisée au chapitre précédent §-9.3.6, a démontré qu'au point **s2**, situé dans cette même zone centrale, la quantité de mouvement était fortement pilotée par la structure liquide en précession à 830 Hz. Cette structure instationnaire pulse donc périodiquement des paquets de gouttes qui sont ensuite éjectés de l'axe par effet d'inertie. Cette instationnarité génère donc à cet endroit une variance de densité de gouttes très forte par rapport à la moyenne locale faible.

La simulation TTGC_CMS_RUE_1 montre les niveaux de ségrégation les plus importants, à la fois dans la direction principale du spray mais également au centre sur l'axe de la chambre. Ensuite les simulations LW_PSI_noRUE_1, puis TTGC_CMS_noRUE_1 montrent une ségrégation moins forte. On retrouve le résultat de Vié *et al.* (2009) qui ont obtenu sur un cas de THI une ségrégation plus élevée avec la stratégie numérique TTGC_RUE_AV_4 qu'avec les stratégies TTGC_AV_1 et PSI_AV_3.

⁶Rappelons que le capteur CMS s'active plus que le capteur CMS-lite, comme cela a été mis en évidence au Chapitre 5.

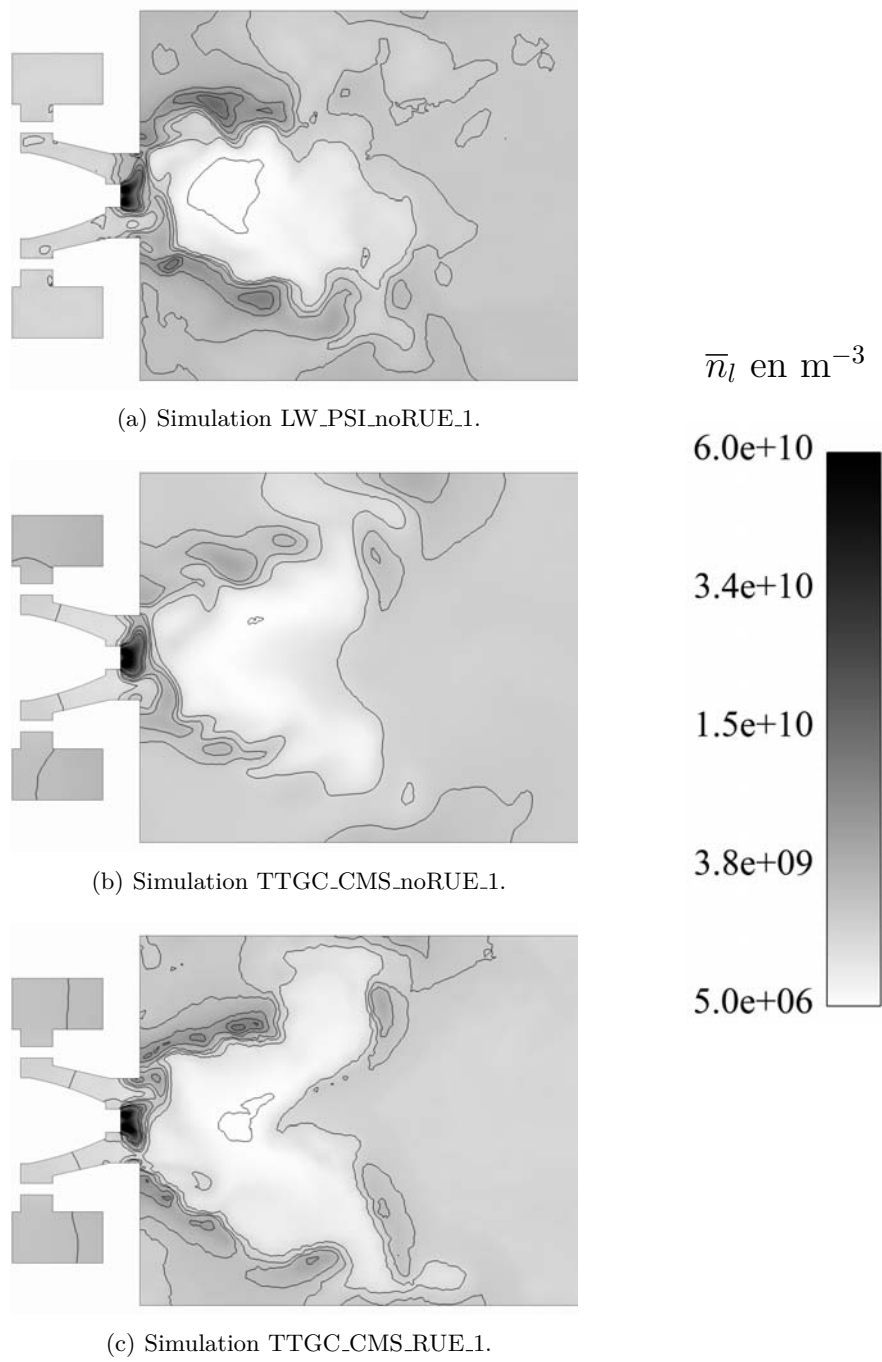


FIG. 10.16: **Cas II** - Coupes longitudinales médianes de la chambre MERCATO présentant un champ instantané de densité volumique de gouttes. Les lignes noires représentent les isocontours $\bar{n}_l = 1.5 \times 10^{10}$, 3.8×10^9 et $5 \times 10^6 m^{-3}$.

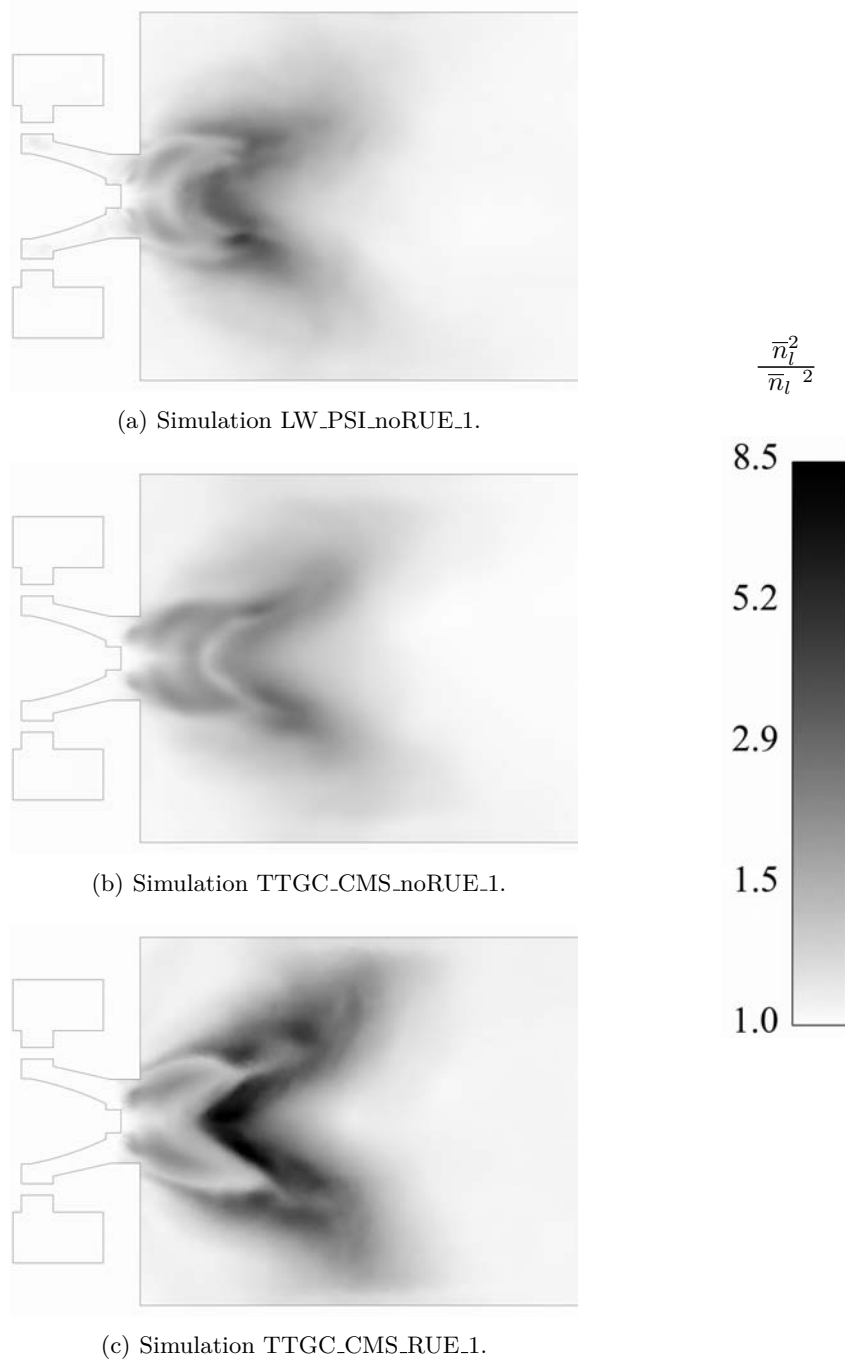


FIG. 10.17: **Cas II** - Coupes longitudinales médianes de la chambre MERCATO présentant la ségrégation de gouttes.

Les champs instantanés de diamètre montrent une grande disparité entre les 3 stratégies numériques, Fig. 10.18. Le champ de la simulation LW_PSI_noRUE_1 montre une dissipation importante dans la direction de l'écoulement. Les gouttes dans le spray, plus petites, ont une inertie plus faible et ressentent moins l'effet centrifuge du mouvement de rotation d'ensemble. Ce phénomène explique la répartition des gouttes (Fig. 10.16(a)) moins ouverte que pour les approches TTGC_CMS_noRUE_1 et TTGC_CMS_RUE_1. La simulation TTGC_CMS_RUE_1 est celle qui diffuse le moins les pics de diamètres, néanmoins comme observé précédemment, l'aspect granulaire du contour démontre des effets dispersifs non contrôlés.

Mélange gazeux

Un champ instantané de fraction massique de carburant kérosène gazeux est présenté à la figure 10.19. A chaque champ est associé sa propre échelle car les 3 champs ne sont correspondent pas au même temps physique et donc à la même valeur moyenne de vapeur de kérosène dans la chambre. Les répartitions de carburant dans la chambre sont très similaires pour les 3 simulations. Néanmoins les fortes fluctuations qui apparaissent en aval après l'impact du spray à la paroi aux Figs. 10.19(b) et 10.19(c) n'apparaissent sur le champ de la Fig. 10.19(a). Du fait de la diffusion du diamètre observée à la Fig. 10.18(a), l'évaporation est beaucoup plus rapide conduisant à une distribution de carburant plus homogène en aval du spray.

Grâce aux mesures expérimentales, il sera possible de statuer sur la distribution de diamètre la plus physique entre les 3 simulations, cf. §-10.2.3. Malheureusement la répartition du carburant dans la chambre n'a pas encore été étudiée sur le banc d'essai MERCATO.

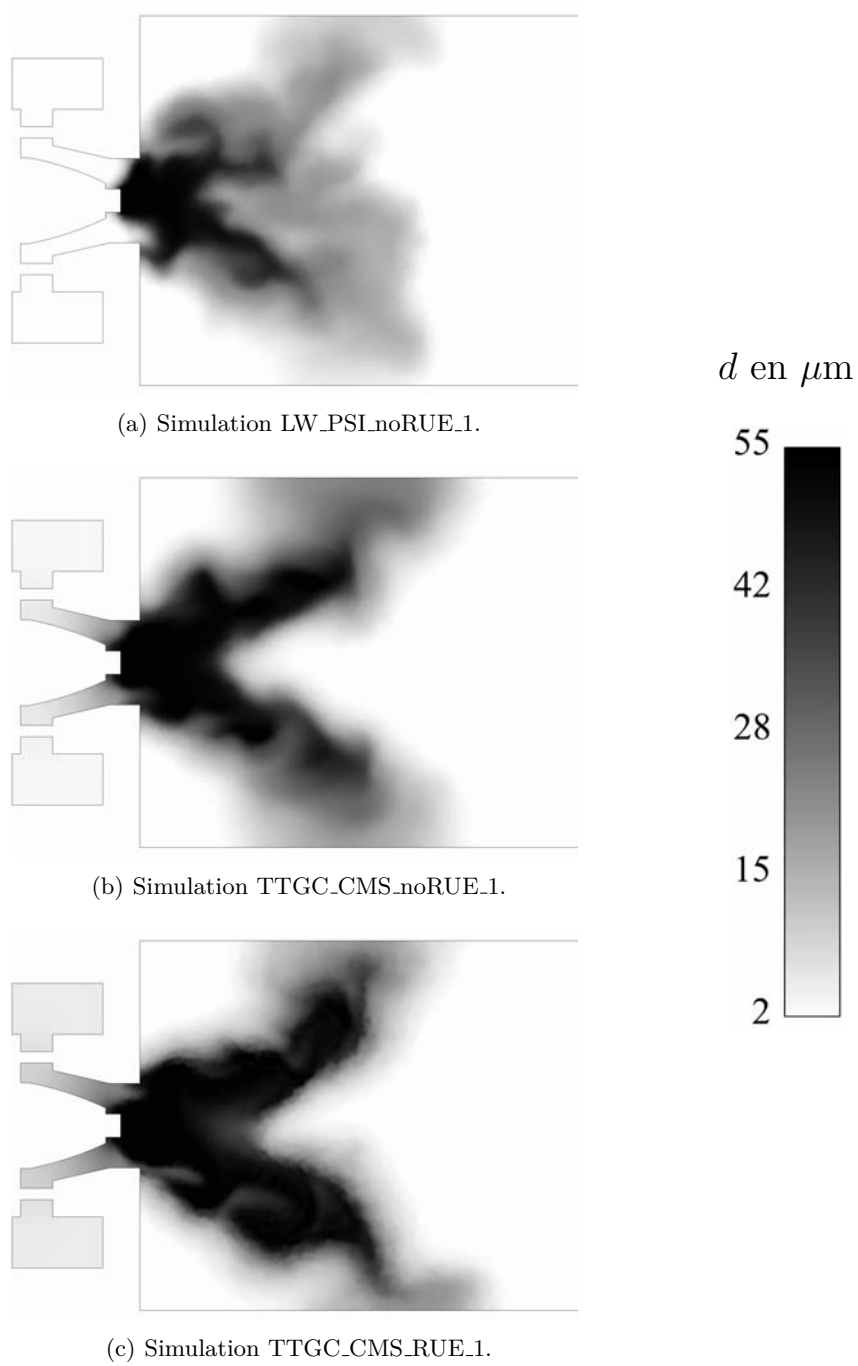
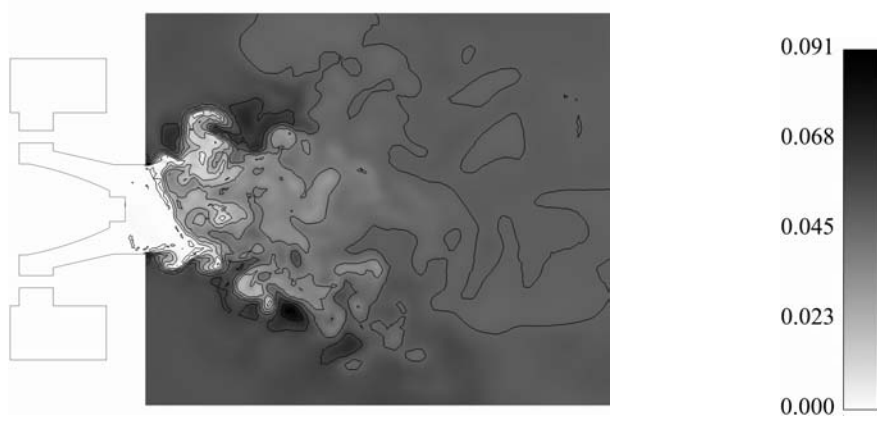
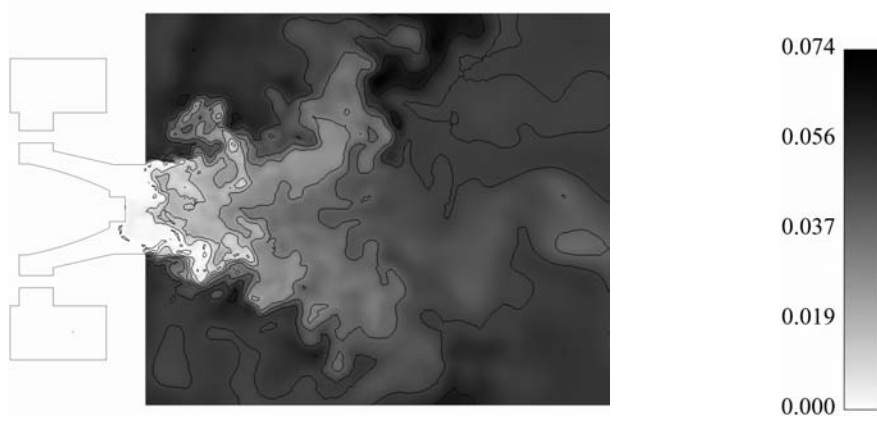


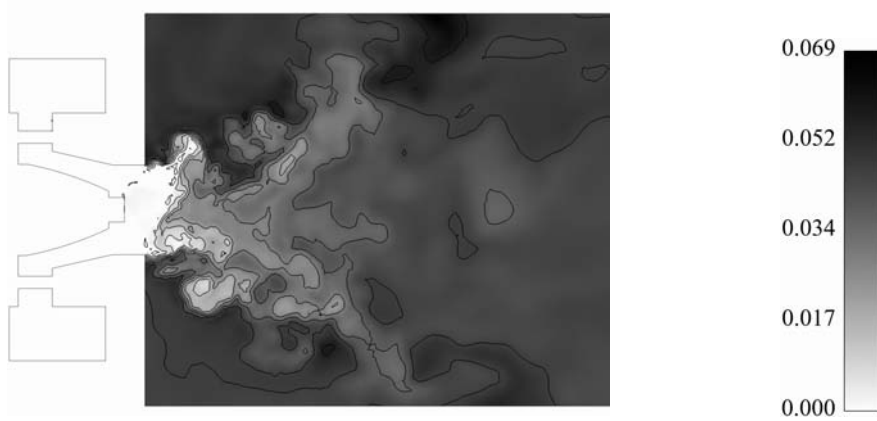
FIG. 10.18: **Cas II** - Coupes longitudinales médianes de la chambre MERCATO présentant un champ instantané de diamètre moyen de gouttes.



(a) Simulation LW_PSI_noRUE_1. Isocontours : $\tilde{Y}_F = 0.045, 0.023$.



(b) Simulation TTGC_CMS_noRUE_1. Isocontours : $\tilde{Y}_F = 0.037, 0.019$.



(c) Simulation TTGC_CMS_RUE_1. Isocontours : $\tilde{Y}_F = 0.034, 0.017$.

FIG. 10.19: Coupes longitudinales médianes de la chambre MERCATO présentant un champ instantané de fraction massique de carburant KERO_LUCHE. Les lignes noires sont des isocontours de $\tilde{Y}_F$ adaptés à chaque échelle.

Dynamique et dissipation

Les champs de vitesse axiale instantanée sont présentés Fig. 10.20 pour les trois stratégies. Les niveaux de vitesse sont identiques pour les trois stratégies numériques, les *maxima* de vitesse se situent le long de la direction principale du spray sous forme de paquets plus ou moins diffus. Pour la simulation LW_PSI_noRUE.1, les paquets sont petits et très intenses et disparaissent rapidement le long de la direction de propagation. Cet effet est certainement lié à la taille des gouttes plus petites dans cette simulation, donc moins inertielles qui subissent plus fortement l'influence de la turbulence de l'écoulement gazeux. Le champ de TTGC_CMS_noRUE.1 présente des paquets plus larges, moins intenses, qui persistent plus en aval. Le champ de la simulation TTGC_CMS_RUE.1 ressemble beaucoup au champ de la simulation TTGC_CMS_noRUE.1, mais les paquets occupent un plus large espace notamment radialement et ils sont également plus intenses. Ainsi les termes sources liés au mouvement décorrélié tendent à dissiper l'énergie cinétique mésoscopique dans la direction perpendiculaire au cisaillement.

En utilisant l'évaluation Eq. (5.22), on peut calculer *a posteriori* un coefficient de viscosité associé à l'opérateur de diffusion artificielle du 2nd ordre et illustré Fig. 10.21. Les paramètres $\epsilon^{(2)}$ pour chaque simulation sont rappelés au Tab. 10.2. Les niveaux de dégradé de gris de la Fig. 10.21 sont saturés près de l'injection (c'est-à-dire que la viscosité artificielle γ est supérieure à 6.0×10^{-2} kg/m/s) pour les champs des simulations TTGC_CMS_noRUE.1 et TTGC_CMS_RUE.1. La résolution des gradients à l'injection en utilisant le schéma TTGC nécessite en effet un ajout important de viscosité. La viscosité artificielle conduit à une diffusion isotrope des quantités qui est visible sur la répartition de diamètre proche injection, Fig. 10.18. Des niveaux de diamètre importants apparaissent en amont de l'injection dans les simulations TTGC_CMS_noRUE.1 et TTGC_CMS_RUE.1. En revanche le schéma PSI, qui diffuse essentiellement dans la direction de propagation, résout un gradient fort de diamètre à l'injection, ce qui est plus physique. Ainsi le schéma PSI semble mieux adapter pour les configurations d'injection.s

Par contre les niveaux de viscosité dans la chambre sont à peu près identiques pour les simulations LW_PSI_noRUE.1 et TTGC_CMS_RUE.1. Il faut garder à l'esprit que dans le cas de la simulation LW_PSI_noRUE.1, le schéma décentré amont PSI introduit naturellement une forte viscosité numérique (cf. Chapitre 5). Cette viscosité peut difficilement être estimée *a posteriori* (Lamarque, 2007). Dans le cas de l'utilisation du capteur CMS_lite (Fig. 10.21(c)), la zone d'activation de la diffusion artificielle est réduite dans l'espace et, malgré le coefficient important $\epsilon^{(2)} = 0.30$, les niveaux de viscosité appliqués sont globalement plus faibles. Dans le cas de la simulation TTGC_CMS_RUE.1, la viscosité $\hat{\nu}_{RUM}$ liée au mouvement décorrélié s'ajoute à la viscosité artificielle dans l'équation de la quantité de mouvement et permet de stabiliser le calcul.

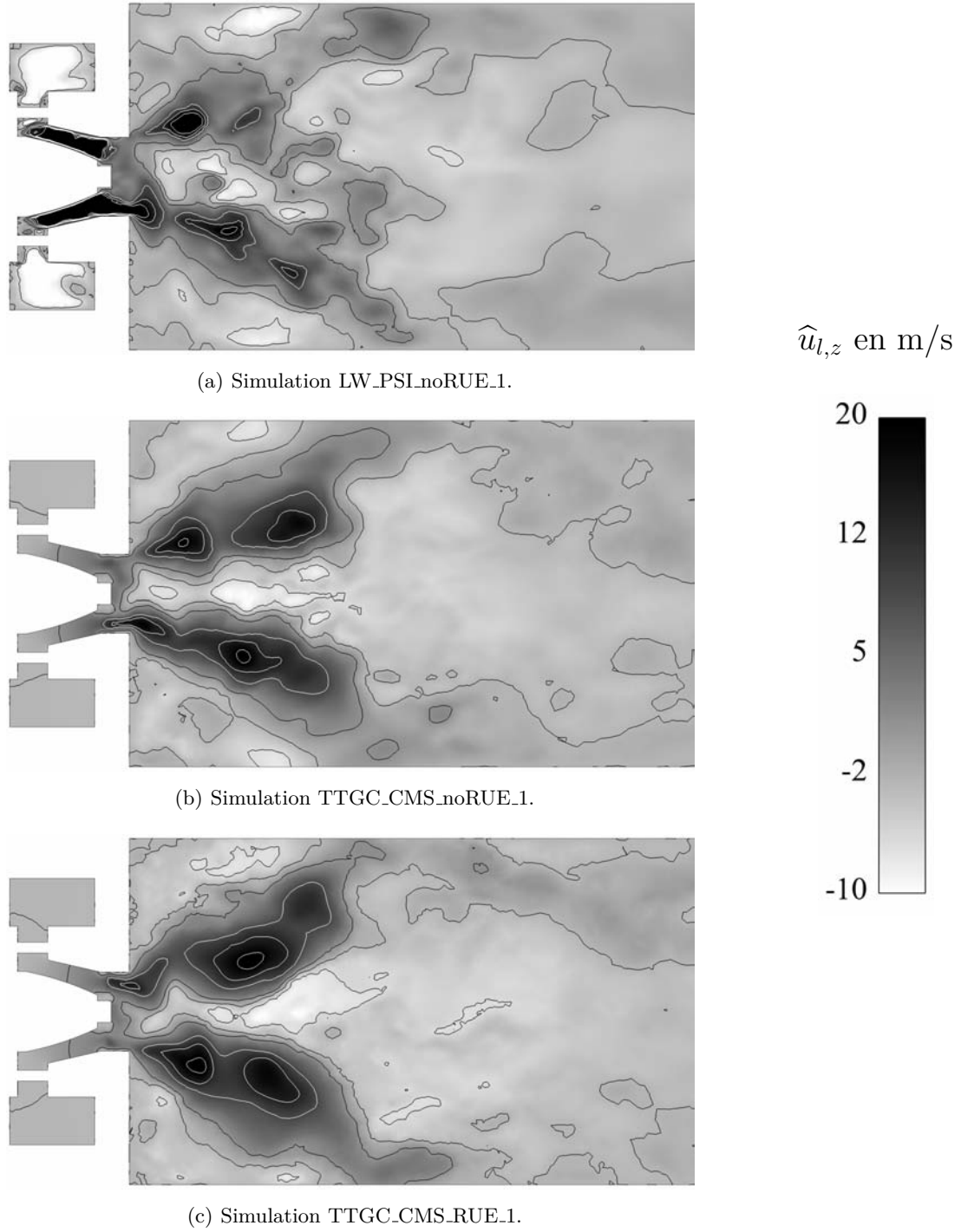


FIG. 10.20: **Cas II** - Coupes longitudinales médianes de la chambre MERCATO présentant un champ instantané de vitesse axiale. Les lignes blanches matérialisent les iso-contours $\hat{u}_{l,z} = 25$ et 15 m/s, les lignes noires, les iso-contours $\hat{u}_{l,z} = 5$ et -5 m/s.

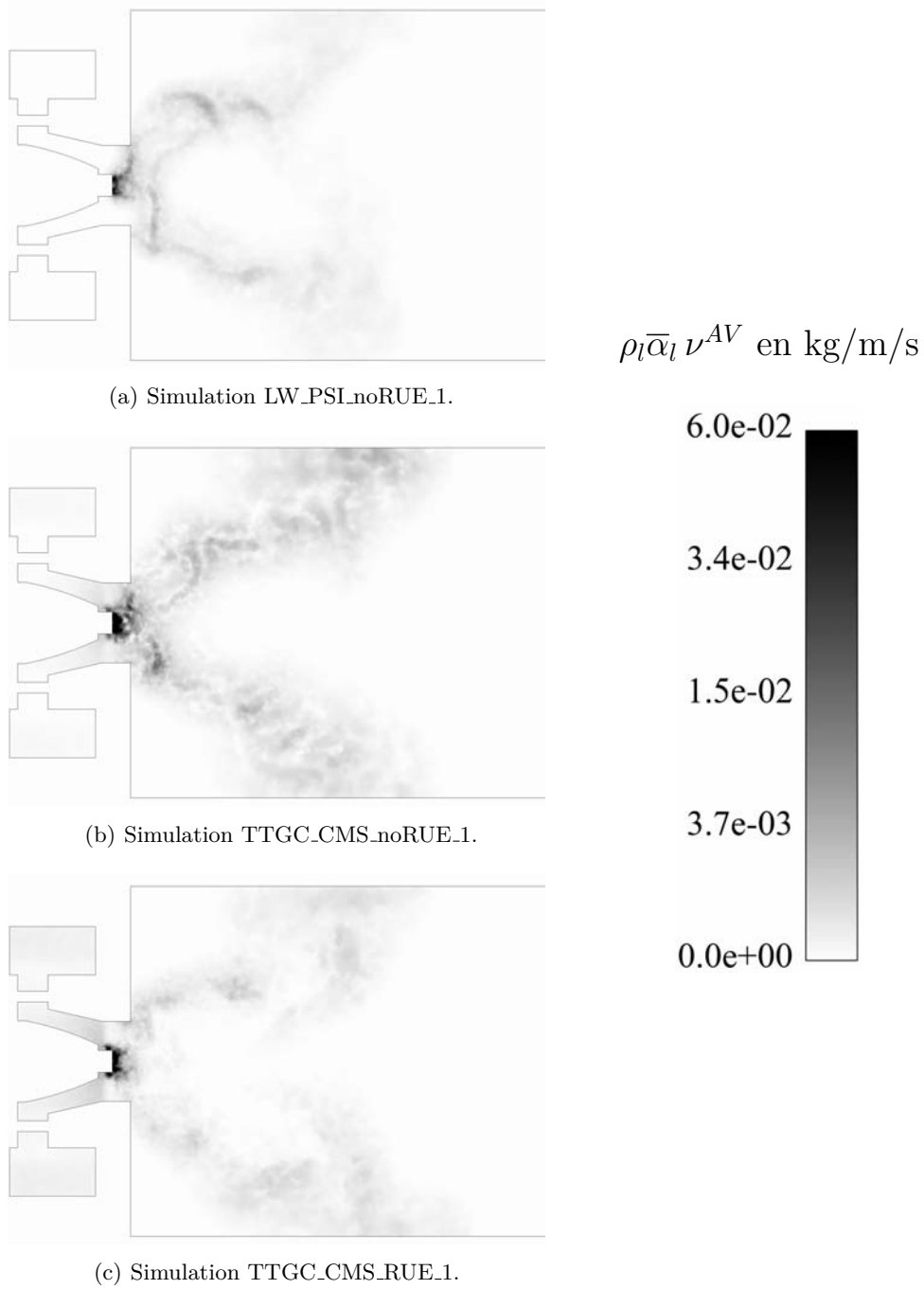
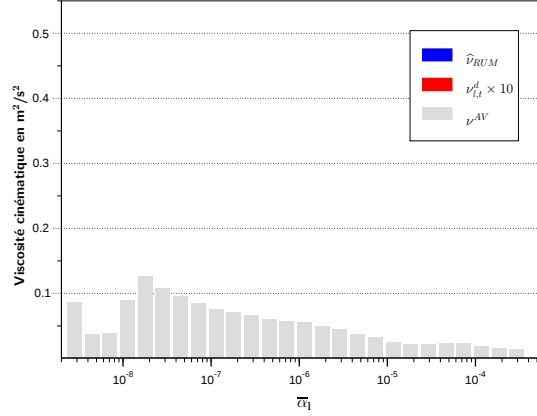
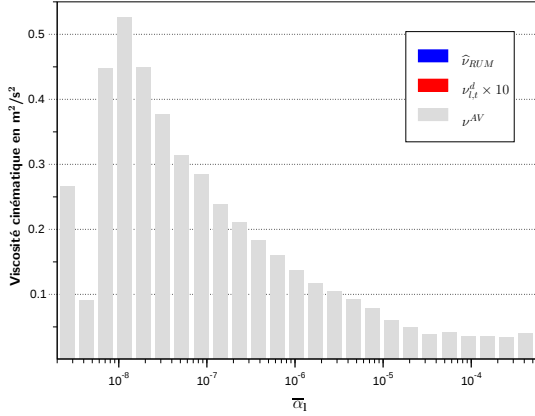


FIG. 10.21: Coupes longitudinales médianes de la chambre MERCATO présentant un champ instantané de diamètre moyen de gouttes.

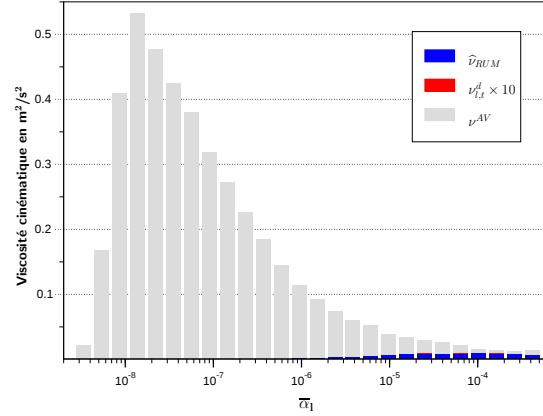
Afin d'évaluer plus finement le niveau des différentes viscosités appliquées dans le calcul, les valeurs des coefficients de viscosité de sous-maille $\nu_{l,t}^d$, liée au mouvement décorrélée $\hat{\nu}_{RUM}$ et artificielle ν^{AV} sont extraites des points de maillages de la chambre de combustion. Les valeurs sont réparties en 25 groupes en fonction de la valeur locale de fraction volumique. Pour chaque groupe la moyenne des coefficients $\nu_{l,t}^d$, $\hat{\nu}_{RUM}$ et ν^{AV} est calculée. L'ensemble est présenté pour les 3 simulations à la Fig. 10.22.



(a) LW_PSI_noRUE.1.



(b) TTGC_CMS_noRUE.1.



(c) TTGC_CMS_RUE.1.

FIG. 10.22: Histogrammes de répartition des coefficients de viscosité en fonction de la fraction volumique.

Pour les trois stratégies numériques, la viscosité turbulente de sous-maille est négligeable devant la viscosité artificielle : le coefficient $\nu_{l,t}^d$ est 100 à 1000 fois plus petit que l'estimation ν^{AV} . Cette observation vient corroborer l'étude réalisée au §-9.3.6, où l'on a constaté que le modèle de sous-maille n'a aucun effet sur la dynamique de la phase dispersée. Le modèle de sous-maille développé dans le cadre d'une THI (Moreau *et al.*, 2009) n'est pas activé pour le type de turbulence rencontrée ici. En effet les échelles de variation de vitesse liquide observée Fig. 10.20 sont plutôt grandes par rapport à la taille de maille, ainsi l'ensemble des fluctuations de vitesse de la phase dispersée sont résolues. De plus, les niveaux de fluctuations de vitesse comparés aux mesures expérimentales sont

en très bon accord, démontrant que les mécanismes instationnaires sont bien captés dans les simulations.

La viscosité artificielle utilisée dans la simulation LW_PSI_noRUE_1 est 5 fois plus faible que dans les calculs employant le schéma TTGC. Par contre, il faut garder à l'esprit qu'à la VA, s'ajoute la diffusion numérique du schéma PSI mise en évidence au Chapitre 5, au §-5.3.2. Pour les trois simulations, l'application de la VA suit le même schéma. Le maximum est atteint pour une valeur faible $\bar{\alpha}_l \approx 1.0 \times 10^{-8}$ et décroît lorsque la fraction volumique augmente. Ainsi dans les zones où la fraction volumique est importante, le senseur CMS est moins fortement activé permettant ainsi de ne pas dégrader la dynamique dans les zones *significatives*⁷ de l'écoulement dispersé.

L'histogramme de répartition de VA en fonction la fraction volumique des simulations TTGC_CMS_noRUE_1 et TTGC_CMS_RUE_1 montrent des tendances similaires. On remarque qu'à partir de $\bar{\alpha}_l \approx 1.0 \times 10^{-6}$ la décroissance de niveau de ν^{AV} est plus importante dans le cas TTGC_CMS_RUE_1. C'est à cette même valeur que la viscosité $\hat{\nu}_{RUM}$ atteint un niveau non-négligeable, et vient palier la diminution de ν^{AV} . Dans la simulation TTGC_CMS_RUE_1, on a donc réussi à diminuer au maximum les niveaux de VA pour les grandes valeurs $\bar{\alpha}_l$ afin de ne pas masquer la viscosité *physique* liée à l'influence du mouvement décorrélé.

Qualitativement, la stratégie numérique PSI_AV_3 choisie pour sa robustesse permet en effet de diminuer de manière significative l'ajout de viscosité artificielle au sein de l'écoulement mais surtout au niveau de l'injection liquide. Néanmoins les champs de densité de gouttes et de distribution de diamètre issus de la simulation LW_PSI_noRUE_1 sont notablement différents des champs issus des simulations TTGC_CMS_noRUE_1 et TTGC_CMS_RUE_1. La comparaison avec les mesures expérimentales permettra de statuer plus précisément sur ces points.

Le senseur CMS développé dans le cadre de cette thèse pour corriger la tendance du senseur JR à s'activer partout dans l'écoulement, cf. §-5.2.2, remplit bien son rôle. L'extension du senseur CMS proposée par Martinez (2009), le senseur CMS-lite, semble également adapté pour la configuration MERCATO : il permet de diminuer la viscosité artificielle de manière à ne pas masquer la dissipation par le mouvement décorrélé. Néanmoins, on a pu constater que les effets de dispersion ne sont pas complètement contrôlés (Figs. 10.16(a) et 10.18(c)). La comparaison des statistiques aux mesures expérimentales, cf. §-10.2.3 permet d'identifier la procédure qui conduit aux résultats les plus *physiques*.

⁷car elles représentent une part importante de la masse de liquide.

10.2.3 Comparaison aux mesures expérimentales

Vitesse liquide

Le schéma numérique PSI a été bâti dans AVBP à partir du schéma LW comme schéma dit haut ordre, cf. Chapitre 5, §-5.3.2. Ainsi sur la phase gazeuse, le schéma employé dans la simulation LW_PSI_noRUE_1 est également le schéma numérique LW et non le schéma TTGC comme pour les simulations TTGC_CMS_noRUE_1 et TTGC_CMS_RUE_1. L'une des premières vérifications consiste donc à s'assurer que l'écoulement gazeux suit la même dynamique dans les trois simulations comparées. En effet l'écoulement gazeux correspond à l'écoulement porteur, il influence au premier ordre la dynamique et la dispersion du spray. Les comparaisons des composantes de vitesse moyenne et de fluctuations RMS de vitesse sont données en annexe A. Dans l'ensemble les schémas LW et TTGC offrent la même précision sur le maillage bien raffiné retenu dans cette étude. Quelques écarts mineurs apparaissent néanmoins sur les profils de fluctuations RMS de vitesse.

Les vitesses moyennes de la phase dispersée issues des trois simulations Euler-Euler présentées au Tab. 10.2 sont comparées aux mesures expérimentales LDA. Les courbes sont présentées à la Fig. 10.23 pour la composante axiale, Fig. 10.24 pour la composante radiale et Fig. 10.25 pour la composante ortho-radiale de vitesse moyenne.

Sur les trois composantes, les profils se superposent quasiment à l'abscisse $z = 6$ mm. Cette observation atteste que les trois simulations utilisent les mêmes profils d'entrée FIM-UR pour l'injection de liquide et que la phase gazeuse influence le spray de manière similaire.

Sur la composante ortho-radiale, les profils restent similaires aux deux autres abscisses $z = 26$ et 56 mm. En revanche pour les composantes axiale et radiale des écarts apparaissent entre les trois simulations à $z = 26$ mm et se creusent à $z = 56$ mm. Pour la composante axiale, la vitesse de recirculation au centre est surestimée pour les stratégies LW_PSI_noRUE_1 et TTGC_CMS_noRUE_1. Sur la composante radiale, les extrema de vitesse sont mal positionnés par rapport aux expériences. Ces différences observées sont à relier directement aux profils de diamètre moyen présentés Fig. 10.29. Les gouttes ont un diamètre inférieur dans les simulations LW_PSI_noRUE_1 et TTGC_CMS_noRUE_1, et sont alors plus sensibles à la dynamique du gaz que ce qu'elles devraient l'être. La diffusion numérique importante, dans la direction principale de propagation, du schéma PSI est bien visible sur les profils à $z = 56$ mm de vitesse axiale et radiale moyenne.

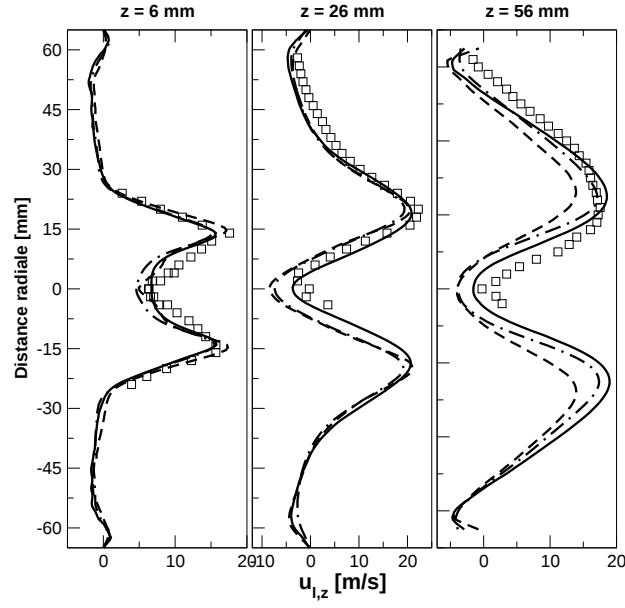


FIG. 10.23: **Cas II** - Profils de vitesse liquide moyenne axiale en m/s. Symboles : LDA ; lignes : simulations AVBP - pointillée : LW_PSL_RUE_1, pleine : TTGC_CMS_RUE_1, point-tirée : TTGC_CMS_noRUE_1.

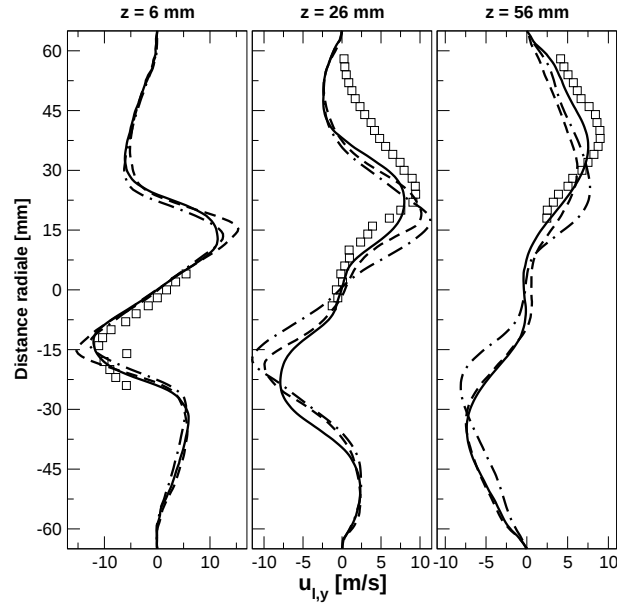


FIG. 10.24: **Cas II** - Profils de vitesse liquide moyenne radiale en m/s. Symboles : LDA ; lignes : simulations AVBP - pointillée : LW_PSL_RUE_1, pleine : TTGC_CMS_RUE_1, point-tirée : TTGC_CMS_noRUE_1.

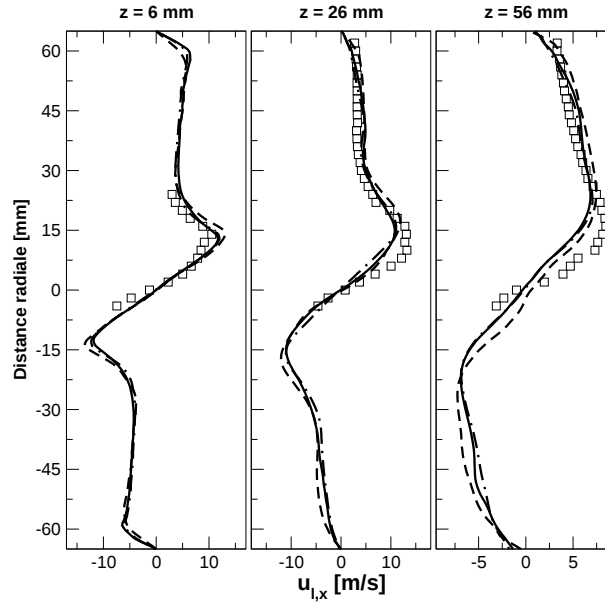


FIG. 10.25: **Cas II** - Profils de vitesse liquide moyenne ortho-radiale en m/s. Symboles : LDA ; lignes : simulations AVBP - pointillée : LW_PSI_RUE_1, pleine : TTGC_CMS_RUE_1, point-tirée : TTGC_CMS_noRUE_1.

Globalement la simulation TTGC_CMS_RUE_1 donne les meilleurs résultats sur toutes les composantes. Les résultats de la simulation LW_PSI_noRUE_1 souffrent de la trop forte dissipation numérique du schéma PSI. La simulation TTGC_CMS_noRUE_1 suit un comportement intermédiaire.

Fluctuations de vitesse liquide

Les fluctuations RMS de vitesse de la phase dispersée issues des trois simulations Euler-Euler présentées au Tab. 10.2 sont comparées aux mesures expérimentales LDA disponibles. Les courbes sont présentées à la Fig. 10.26 pour la composante axiale, Fig. 10.27 pour la composante radiale et Fig. 10.28 pour la composante ortho-radiale de vitesse moyenne. Globalement là encore, la simulation TTGC_CMS_RUE_1 donne les meilleurs résultats en raison de la prise en compte du mouvement décorrélé.

On note que les fluctuations de vitesse sont assez bien prédites dans la simulation LW_PSI_noRUE_1, et ce malgré le fait que l'agitation liée au mouvement décorrélé ne soit pas considérée d'une part, et que le schéma PSI soit fortement dissipatif d'autre part. Ce constat peut être relié au champ de diamètre très diffusé (Fig. 10.18(a)). Les gouttes, plus petites, dans la simulation LW_PSI_noRUE_1, ont une dynamique plus fortement influencée par les fluctuations de la phase gazeuse que ne le sont les grosses gouttes, plus inertielles, des simulations TTGC_CMS_RUE_1 et TTGC_CMS_noRUE_1. Ainsi les niveaux de fluctuation de vitesse liquide sont à prendre avec précaution : la dissipation du schéma sur la dynamique pourrait être compensée sur ces profils par la diffusion du

diamètre.

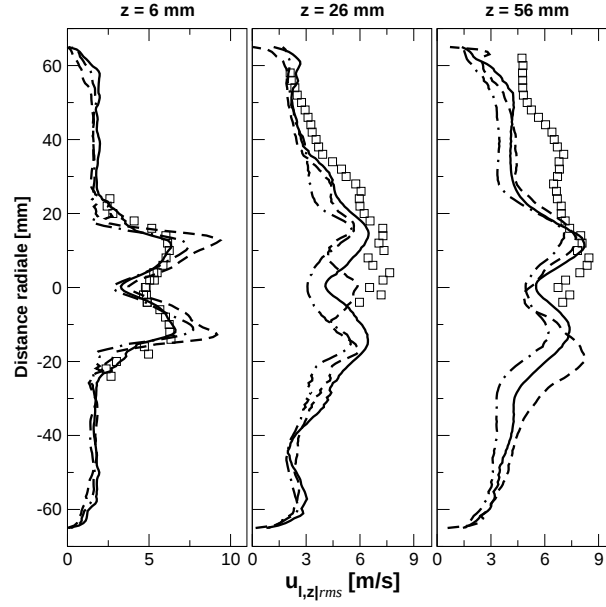


FIG. 10.26: **Cas II** - Profils d'écart-type de vitesse liquide axiale en m/s. Symboles : LDA ; lignes : simulations AVBP - pointillée : LW-PSI-RUE-1, pleine : TTGC-CMS-RUE-1, point-tirée : TTGC-CMS-noRUE-1.

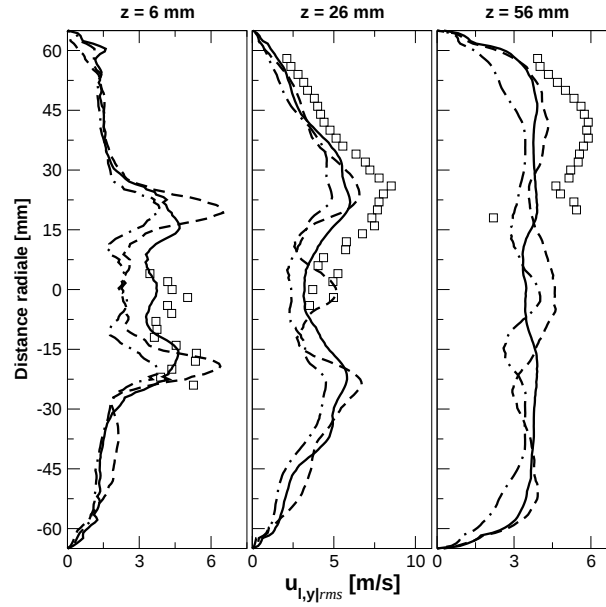


FIG. 10.27: **Cas II** - Profils d'écart-type de vitesse liquide radiale en m/s. Symboles : LDA ; lignes : simulations AVBP - pointillée : LW-PSI-RUE-1, pleine : TTGC-CMS-RUE-1, point-tirée : TTGC-CMS-noRUE-1.

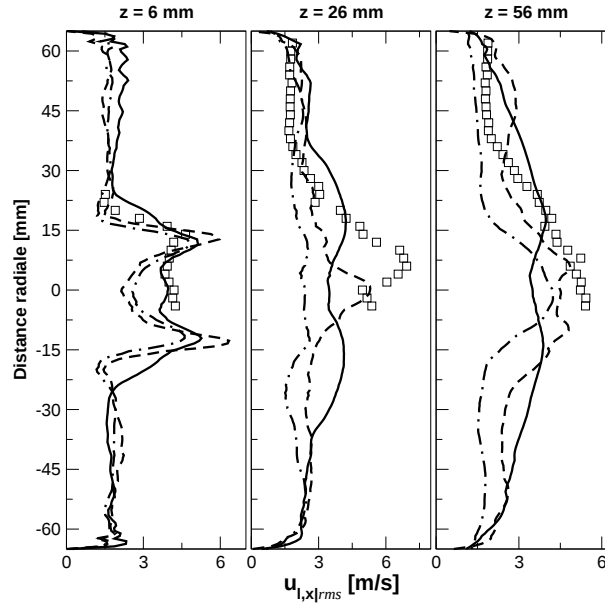


FIG. 10.28: **Cas II** - Profils d'écart-type de vitesse liquide ortho-radiale en m/s. Symboles : LDA ; lignes : simulations AVBP - pointillée : LW_PSI_RUE_1, pleine : TTGC_CMS_RUE_1, point-tirée : TTGC_CMS_noRUE_1.

Diamètre de gouttes

Les profils de diamètre moyen du spray issu des trois simulations Euler-Euler présentées au Tab. 10.2 sont comparés aux mesures expérimentales PDA disponibles.

Dans l'ensemble, les trois simulations fournissent la même tendance d'évolution des profils de diamètre : le profil est initialement plat, lié à l'injection monodisperse, évolue vers un profil à deux bosses. Les trois simulations conduisent à des forts écarts avec les profils expérimentaux. La diffusion numérique du schéma PSI est très pénalisante, puisque le diamètre moyen diminue de manière visible le long de la composante axiale. L'évaporation des gouttes du spray est artificiellement plus rapide dans la simulation LW_PSI_noRUE_1. La simulation TTGC_CMS_noRUE_1 a un comportement intermédiaire aux deux autres simulations, le tri ballistique est accentué dans cette simulation : au centre les gouttes sont aussi petites que dans la simulation LW_PSI_noRUE_1, le long de la direction principale du spray, les gouttes sont aussi grosses que dans la simulation TTGC_CMS_RUE_1, et sur l'extérieur du spray les gouttes sont plus grosses que dans la simulation TTGC_CMS_RUE_1. Des trois stratégies, la simulation TTGC_CMS_RUE_1 fournit les meilleurs résultats : les valeurs des *extrema* de diamètre mesurés sont bien reproduits bien que les profils n'aient pas la même forme.

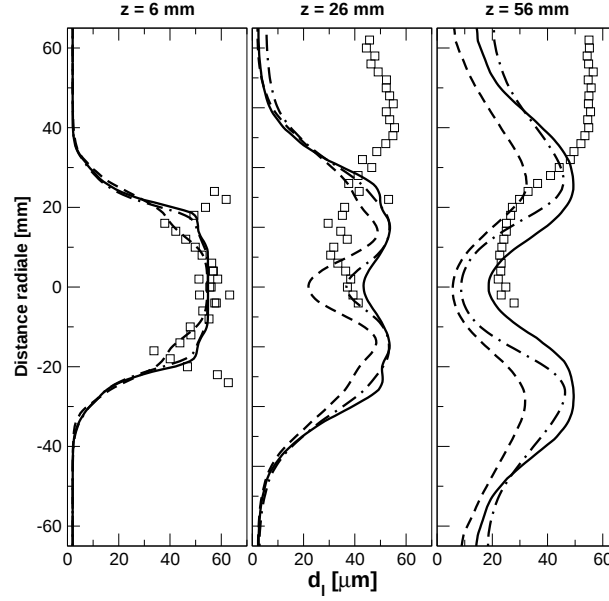


FIG. 10.29: **Cas II** - Profils de diamètre moyen en μm . Symboles : PDA ; lignes : simulations AVBP - pointillée : LW_PSI_noRUE_1, pleine : TTGC_CMS_RUE_1, point-tirée : TTGC_CMS_noRUE_1.

10.2.4 Conservation de la masse

Pour stabiliser le calcul, les stratégies TTGC_AV_3 et TTGC_RUE_AV_4 requièrent de limiter la fraction volumique et la densité de goutte au-dessus des valeurs seuils spécifiées à l'Eq. (9.13). Cet artefact numérique est une source de masse additionnelle dans le calcul, qui est suivie au cours des simulations. A l'issue du temps physique simulé, la masse ajoutée par le *clipping* est comparée à la masse totale de liquide injectée au cours des simulations dans le Tab. 10.3. La masse ajoutée par le *clipping* cumulée au cours des simulations reste bien négligeable par rapport à la masse de liquide injectée. Le limiteur employé ne modifie pas le bilan de masse.

Simulation	Temps physique simulé (ms)	Masse liquide (kg)	
		injectée	<i>clipping</i>
TTGC_CMS_noRUE_1	269.89	2.699×10^{-4}	5.548×10^{-12}
TTGC_CMS_RUE_1	219.24	2.192×10^{-4}	8.842×10^{-15}
TTGC_CMS_RUE_2	222.65	4.452×10^{-4}	8.519×10^{-15}

TAB. 10.3: Bilans de masse au cours des simulations employant le schéma TTGC.

10.2.5 Efficacité en temps de calcul

En utilisant les définitions données aux Eqs. (10.1) et (10.2), on peut calculer l'efficacité et l'efficacité réduite associées à chaque stratégie tournée sur le *cluster* Bluegene/P d'Argonne.

Stratégies numériques	Temps CPU par processeur (s)	n_{iter}	n_{proc}	E (s/it/no/proc)	RE (s/it/no)
TTGC_AV_3	40164.87	90000	1024	6.87×10^{-7}	7.04×10^{-4}
TTGC_RUE_AV_4	42305.93	92000	1024	7.08×10^{-7}	7.25×10^{-4}
PSI_AV_3	33266.67	38000	512	1.35×10^{-6}	6.90×10^{-4}

TAB. 10.4: Temps de calcul et efficacité

L'efficacité réduite pour les trois stratégies numériques est comparables, le schéma PSI semble même légèrement plus efficace. Le coût de calcul additionnel pour calculer le limiteur de résidus est compensé par l'utilisation du schéma d'avancement temporel Lax-Wendroff qui s'effectue en une seule étape contrairement au schéma TTGC qui est construit en deux étapes prédiction/correction. La résolution de l'énergie décorrélée entraîne un léger surcoût lié notamment aux calculs des termes de transfert d'énergie entre le mouvement *mésoscopique* et le mouvement décorrélé.

10.2.6 Conclusions

L'ensemble des observations peut se résumer selon le tableau suivant :

	LW_PSI_noRUE_1	TTGC_CMS_noRUE_1	TTGC_CMS_RUE_1
moyennes	—	—/+	+
écart-types	+	—	+
diamètres	—	—/+	—/+
coût CPU	+	—/+	—

TAB. 10.5: Résumé des observations faites sur les comparaisons des profils avec les mesures expérimentales. Les différents statistiques observées sont notée : — mauvais accord, —/+ accord correct, + bon accord.

A la vue de cette compilation des résultats, on peut considérer que la stratégie numérique TTGC_RUE_AV_4 fournit les résultats les plus en accord avec les mesures expérimentales LDA-PDA. La résolution de l'énergie du mouvement décorrélé et la minimisation de l'application de viscosité artificielle permettent de capter la bonne physique de dispersion du spray et de conserver la précision du schéma numérique TTGC. Néanmoins la stratégie PSI_AV_3 peut être une première approche efficace pour obtenir une première idée de la physique de l'écoulement diphasique étudié. En effet cette stratégie est très

simple à mettre en place, du fait de sa robustesse, et un petit plus efficace que la stratégie TTGC_RUE_AV_4. Elle résoud également de manière plus physique les forts gradients à l'injection. Elle peut servir pour initialiser un calcul et passer rapidement la phase transitoire de l'écoulement. La stratégie TTGC_AV_3 n'a pas vraiment un fort intérêt : elle est plus délicate à mettre en place que la stratégie TTGC_RUE_AV_4 car elle ne résoud pas l'effet stabilisant du mouvement décorrélé, elle n'apporte pas beaucoup plus de précision que la stratégie PSI_AV_3, pour un coût CPU plus élevé.

10.3 Évaluation de la méthodologie FIM-UR

Pour établir la condition limite d'injection au point de fonctionnement **Cas III**, les mêmes paramètres d'entrée, donnés au Tab. 9.4, pour le modèle FIM-UR sont utilisés, en particulier le diamètre moyen d'injection est identique. La répartition de fraction volumique est identique mais les composantes axiale, radiale et ortho-radiale de la vitesse débitante sont plus importantes pour le cas à 2 g/s de kérosène liquide injecté.

Les profils des données extraites des composantes de la vitesse moyenne et de diamètre moyen sont comparés à l'abscisse $z = 6 \text{ mm}^8$ aux mesures expérimentales. Les fluctuations RMS de vitesse et de diamètre sont données en annexe B

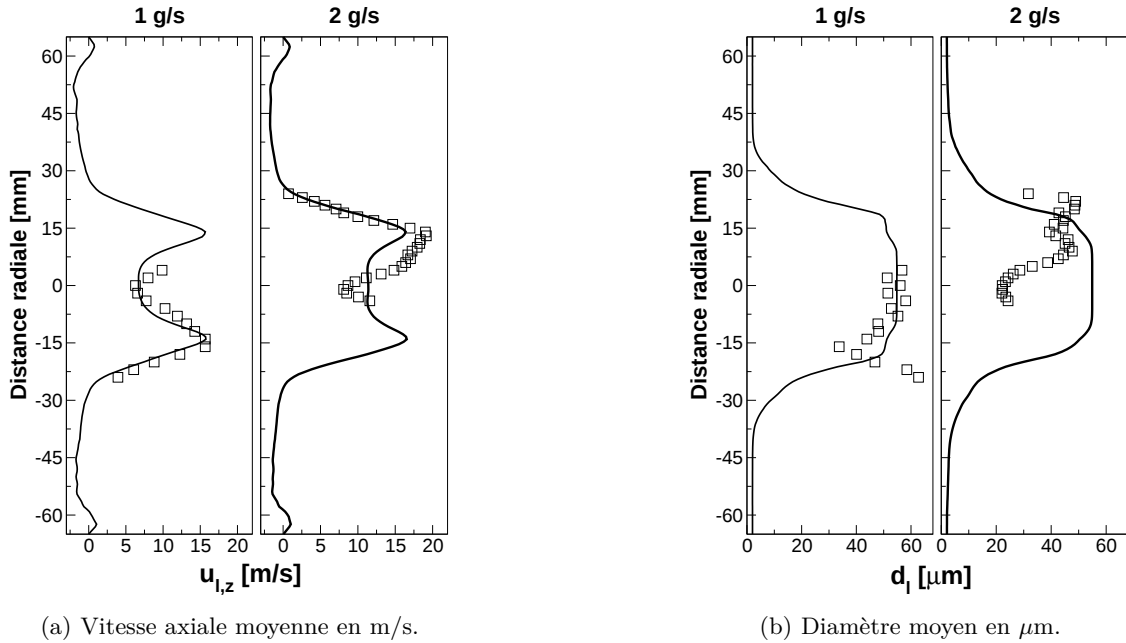


FIG. 10.30: Profils à $z = 6 \text{ mm}$ pour les deux débits calculés. Symboles : mesure LDA (gauche) et PDA (droite), lignes : simulations TTGC_CMS_RUE_1 (**Cas II**) et TTGC_CMS_RUE_2 (**Cas III**).

⁸Seule donnée disponible pour ce point de fonctionnement.

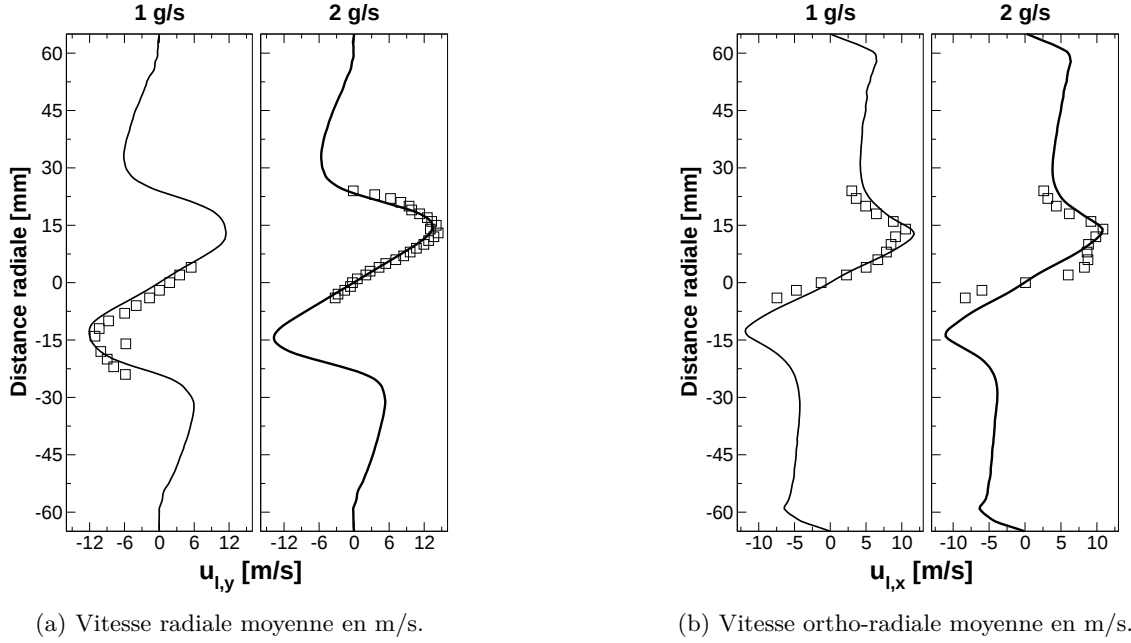


FIG. 10.31: Profils à $z = 6$ mm pour les deux débits calculés. Symboles : mesure LDA, lignes : simulations TTGC-CMS-RUE_1 (**Cas II**) et TTGC-CMS-RUE_2 (**Cas III**).

Si l'on compare l'évolution des profils du **Cas II** au **Cas III**, on constate que le modèle FIM-UR permet de reproduire l'augmentation des *extrema* de la vitesse axiale (Fig. 10.30(a)) et de la vitesse radiale (Fig. 10.31(a)) observée dans les mesures LDA. Néanmoins les profils expérimentaux présentent des différences fondamentales entre les **Cas II** et **Cas III** : les pics sont beaucoup plus larges sur les composantes ortho-radiale et axiale et la composante axiale montre au centre des valeurs de vitesse très faibles. Cette modification de la forme des profils expérimentaux de vitesse est directement liée à la modification de la répartition de diamètres dans le spray (Fig. 10.30(b)) . Si pour le **Cas II** le spray était fortement monodisperse de diamètre $d_{10} = 55 \mu\text{m}$, le **Cas III** présente un spray dominé par deux classes de gouttes distinctes : l'une à $20 \mu\text{m}$ et l'autre à $40 \mu\text{m}$. Cette polydispersion spatiale forte du spray formé en sortie d'atomiseur ne peut pas être reproduite avec le modèle FIM-UR actuel. Ces deux classes de gouttes pilotent la dynamique de la phase dispersée et explique l'élargissement des pics de vitesse. Les petites gouttes moins inertielles restent plus confinées au centre de l'écoulement et sont plus influencées par la phase gazeuse et donc ralenties par l'écoulement gazeux recirculant.

Cette comparaison démontre d'une part les bonnes tendances capturées par le modèle FIM-UR (augmentation des composantes de vitesse axiale et radiale) et les limitations du modèle actuel d'autre part. La prise en compte de plusieurs classes de gouttes doit faire partie des développements futurs du modèle FIM-UR. Cette évolution pourra être testée sur la simulation du **Cas III** avec l'approche multi-fluide en cours de développement.

Conclusions et Perspectives

L'objectif général de cette thèse est d'évaluer la qualité des résultats numériques de la méthode Euler-Euler pour la simulation aux grandes échelles (LES) diphasique dans une configuration complexe. Le banc d'essai MERCATO installé à l'ONERA Fauga-Mauzac a été choisi comme configuration de validation. Un point de fonctionnement non-réactif mais préchauffé a été sélectionné afin d'évaluer la capacité de la LES diphasique à reproduire les quantités moyennes et instantanées d'un écoulement turbulent diphasique évaporant. Ce travail sur la configuration MERCATO a nécessité l'utilisation de stratégies numériques adaptées à l'approche Euler-Euler *mésoscopique* et le développement de modèles physiques.

Le système d'équations de la phase dispersée est difficile à résoudre numériquement car il ne contient ni terme de pression, ni terme de dissipation visqueuse laminaire. La phase dispersée est alors fortement compressible et simuler un tel écoulement présentant des fronts raides, des gradients forts, des zones de choc et des zones de vide de gouttes est un véritable challenge en LES. Les méthodes envisagées doivent apporter robustesse et précision dans le temps et dans l'espace. Trois stratégies numériques pour la méthode Euler-Euler *mésoscopique* implantée dans AVBP ont été évaluées. Deux utilisent un schéma centré d'ordre élevé et de la viscosité artificielle appliquée localement par un senseur adapté. Les deux stratégies diffèrent essentiellement par la prise en compte de la dissipation liée à l'agitation décorrélée du mouvement *mésoscopique* des particules. La troisième stratégie utilise un schéma décentré amont nouvellement implanté dans AVBP.

Pour simuler de manière satisfaisante la configuration MERCATO, de nouveaux modèles ont été développés afin de reproduire la physique du spray de kérosène : l'injection et l'atomisation du spray d'une part, l'évaporation des gouttes d'autre part. Le kérosène est modélisé par une *méta-espèce* appelée KERO.LUCHE. Ses propriétés thermodynamiques et de transport reproduisent les données obtenues dans la littérature et ont été validées sur des mesures expérimentales d'évaporation de gouttes isolées. La vitesse d'évaporation pour le point de fonctionnement étudié dans la chambre MERCATO est en accord aux mesures expérimentales de Ghassemi *et al.* (2006). L'injection de liquide sur le banc MERCATO est réalisée par un atomiseur pressurisé-swirlé. Une méthodologie, appelée FIM-UR, a été développée pour établir des profils de condition limite dans la simulation LES à partir des données de calibration de l'atomiseur. Cette méthodologie repose sur des profils présumés pour un atomiseur pressurisé-swirlé qu'il faudrait confronter à des simulations numériques d'atomisation.

Les statistiques issues des simulations LES Euler-Euler sur la configuration MERCATO ont été comparées aux mesures expérimentales fournies par l'ONERA. Les simulations sont en bon accord avec les mesures expérimentales LDA-PDA des deux phases. Des trois stratégies numériques mises en oeuvre, la stratégie TTGC_RUE_AV_4 apporte la meilleure précision. La viscosité ajoutée comporte une part physique qui correspond à l'effet de l'agitation décorrélée sur le mouvement d'ensemble des gouttes, et une partie artificielle dont l'application est contrôlée par le senseur. La viscosité artificielle ajoutée permet de dissiper les erreurs numériques liées à la dispersion du schéma tout en conservant un maximum de fronts pour résoudre avec précision la dynamique de l'écoulement diphasique. La résolution de l'équation de l'énergie décorrélée est essentielle pour bien capter les niveaux de fluctuations mesurés expérimentalement.

Les statistiques d'une simulation Euler-Lagrange monodisperse, réalisée par J.-M. Senoner, en employant les mêmes modèles physique d'injection et d'évaporation apportent le même niveau de précision que la simulation Euler-Euler retenue. L'injection d'un spray monodisperse semble limiter dans les deux approches la qualité des champ de distribution de diamètre prédits à l'extérieur du spray.

La comparaison des calculs Euler-Euler réalisés à deux débits différents en utilisant les mêmes paramètres pour décrire le spray et l'atomiseur a mis en évidence les limitations de la méthodologie employée pour l'injection. Si le modèle FIM-UR actuel fournit des profils de condition limite bien appropriés pour un spray monodisperse (**Cas II**), il ne permet pas de capter la dynamique du spray fortement polydisperse produit par l'atomiseur pour le **Cas III**. En effet, en augmentant le débit injecté, le spray produit est influencé par la dynamique de deux classes de gouttes distinctes.

Enfin l'analyse de la simulation LES Euler-Euler a permis d'identifier les phénomènes stationnaires qui pilotent la dynamique des deux phases de l'écoulement. Associée à l'instabilité hydrodynamique PVC caractéristique des écoulement fortement swirlés, une structure en précession a pu être identifiée sur la phase dispersée. Cette structure influence fortement la dynamique de la phase dispersée et les mécanismes de transfert entre les phases dans une large zone proche injection. L'évaporation du carburant est importante lorsque les gouttes atteignent la température d'équilibre T_{wb} . Le carburant vapeur produit au centre ou sur les bords du spray est rapidement homogénéisé par la forte turbulence de l'écoulement gazeux. En revanche, le carburant évaporé dans la zone de recirculation de coins reste piégé et il se forme une zone de forte richesse gazeuse qui serait favorable à un allumage, à la stabilisation et à la propagation du noyau de flamme. Cette zone génère également des poches de gaz riches en carburant convectées en aval vers la sortie de la chambre le long des parois de la chambre.

Le travail de validation de la méthode Euler-Euler pour les chambres de combustion à carburant liquide s'est inscrit dans la continuité des travaux précédents réalisés sur le code AVBP, en augmentant la complexité de la configuration de validation vers le problème industriel global. Au phénomène de dispersion des particules précédemment étudié (Riber *et al.*, 2009), les phénomènes d'injection, d'évaporation et de mélange ont été pris en compte et analysés sur la configuration MERCATO. Les prochains travaux doivent permettre de tendre vers la validation d'un écoulement diphasique réactif en configuration

complexe après les travaux de faisabilité réalisés par Boileau (2007). Cette validation devra évidemment s'effectuer en plusieurs étapes. Tout d'abord les phénomènes d'évaporation et d'oxydation du kérosène (Franzelli *et al.*, 2009) doivent être mis à l'épreuve sur des configurations académiques de flamme diphasique laminaire (Greenberg & Sarig, 1996) puis turbulente (Réveillon & Vervisch, 2005). Les nouvelles campagnes de mesures récemment réalisées sur le banc MERCATO pour caractériser l'écoulement diphasique réactif stabilisé (Lecourt, 2008a) permettront d'évaluer la méthode Euler-Euler en combustion.

Les comparaisons des résultats des simulations Euler-Euler aux mesures LDA-PDA ont montré des erreurs de prédiction de la distribution des diamètres de goutte dans la chambre MERCATO. Cette imprécision est notamment liée à l'utilisation d'une méthode monodisperse. Ainsi les travaux présentés dans ce manuscrit appellent des développements ultérieurs qui sont déjà lancés. La méthode Euler-Euler *mésoscopique* est actuellement étendue à l'approche multi-fluide (Laurent *et al.*, 2004) par Vié (2010) dans le cadre de sa thèse. Cette évolution de la méthode Euler-Euler est actuellement portée sur la configuration MERCATO, en prenant en compte 5 à 10 classes de taille de goutte pour mieux capturer la dynamique et la dispersion du spray dans la chambre. Comme cela a été identifié au dernier chapitre de ce manuscrit, cette extension doit également être réalisée pour la méthodologie FIM-UR, afin de bien capter la qualité du spray injecté.

Bibliographie

- B. Abramzon & W. A. Sirignano. Droplet vaporisation model for spray combustion calculations. *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 9:1605–1618, 1989.
- G. Albouze. *Simulation aux grandes échelles des écoulements réactifs non prémélangés*. PhD thesis, Université de Toulouse - Ecole doctorale MEGeP, CERFACS - CFD Team, Toulouse, 2009.
- S. Apte, K. Mahesh, & P. Moin. Large-eddy simulation of evaporating spray in a coaxial combustor. *Proc. Combust. Inst.*, 32(2):2247–2256, 2009.
- S. V. Apte, K. Mahesh, P. Moin, & J. C. Oefelein. Large-eddy simulation of swirling particle-laden flows in a coaxial-jet combustor. *Int. J. Multiphase Flow*, 29(8):1311–1331, 2003.
- R. S. Barlow. Overview of the TNF Workshop. Conference speech, April 2006.
- L. P. Bayvel & Z. Orzechowski. *Liquid Atomization*. Combustion (Hemisphere Publishing Corporation). Taylor & Francis, Washington, USA, 1993.
- G. Berkooz, P. Holmes, & J. L. Lumley. The proper orthogonal decomposition in the analysis of turbulent flows. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 25:539–575, 1993.
- R. B. Bird, W. E. Stewart, & E. N. Lighfoot. *Transport phenomena*. John Wiley & Sons, New-York, USA, 2nd edition, 2002.
- M. Boileau. *Simulation aux grandes échelles de l’allumage diphasique des foyers aéronautiques*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, France - Dynamique des Fluides, 2007.
- M. Boileau, S. Pascaud, E. Riber, B. Cuenot, L.Y.M. Gicquel, T. Poinso, & M. Cazalens. Investigation of two-fluid methods for Large Eddy Simulation of spray combustion in Gas Turbines. *Flow, Turb. and Combustion*, 80(3):291–321, 2008a.
- M. Boileau, G. Staffelbach, B. Cuenot, T. Poinso, & C. Béat. LES of an ignition sequence in a gas turbine engine. *Combust. Flame*, 154(1-2):2–22, 2008b.
- M. Boivin, O. Simonin, & K. D. Squires. Direct numerical simulation of turbulence modulation by particles in isotropic turbulence. *J. Fluid Mech.*, 375:235–263, 1998.
- M. Boivin, O. Simonin, & K. D. Squires. On the prediction of gas-solid flows with two-way coupling using large eddy simulation. *Phys. Fluids*, 12(8):2080–2090, 2000.

- J. Borée, T. Ishima, & I. Flour. The effect of mass loading and inter-particle collisions on the development of the polydispersed two-phase flow downstream of a confined bluff body. *J. Fluid Mech.*, 443:129–165, 2001.
- G. Boudier, L. Y. M. Gicquel, T. Poinso, D. Bissières, & C. Bérat. Comparison of LES, RANS and experiments in an aeronautical gas turbine combustion chamber. *Proc. Combust. Inst.*, 31:3075–3082, 2007.
- D.R. Carlisle. Communication on The performance of a type of swirl atomizer, by A. Radcliffe. *Proc. Instn. Mech. Engrs.*, 169:101, 1955.
- S. Chapman & T. G. Cowling. *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*. (digital reprint 1999). Cambridge University Press, Cambridge Mathematical Library edition, 1939.
- M. W. Chase. *NIST-JANAF Thermochemical Tables*. National Institute of Standards and Technology, 4th edition edition, 1998.
- C. Chauveau, F. Halter, A. Lalonde, & I. Gokalp. An experimental study on the droplet vaporization : effects of heat conduction through the support fiber. In *ILASS*, number 4-1, Como Lake, Italy, 2008.
- R. Clift, J. R. Grace, & M. E. Weber. *Bubbles, Drops, and Particles*. Academic Press, 1978.
- O. Colin. *Simulations aux grandes échelles de la combustion turbulente prémélangée dans les statoréacteurs*. Phd thesis, INP Toulouse, 2000.
- O. Colin & M. Rudgyard. Development of high-order taylor-galerkin schemes for unsteady calculations. *J. Comput. Phys.*, 162(2):338–371, 2000.
- Coordinating Research Council. Handbook of aviation fuel properties. Report 635, Coordinating Research Council, Alpharetta, GA, USA, 2004.
- G.E. Cossali. An integral model for gas entrainment into full cone sprays. *J. Fluid Mech.*, 439:353–366, 2001.
- Philippe Dagaut & Michel Cathonnet. The ignition, oxidation, and combustion of kerosene : A review of experimental and kinetic modeling. *Progress in Energy and Combustion Science*, 32(1):48–92, 2006.
- Philippe Dagaut, Abderrahman El Bakali, & Alain Ristori. The combustion of kerosene : Experimental results and kinetic modelling using 1- to 3-component surrogate model fuels. *Fuel*, 85(7-8):944–956, 2006.
- N. Darabiha, F. Lacas, J.C. Rolon, & S. Candel. Laminar counterflow spray diffusion flames : A comparison between experimental results and complex chemistry calculations. *Combust. Flame*, 95:261–275, 1993.
- S. De Chaisemartin. *Modèles Eulériens et Simulation Numérique de la dispersion turbulente de brouillards qui s'évaporent*. PhD thesis, Ecole Centrale de Paris, Chatenay-Malabry, France, 2009.

- O. Desjardins, R. O. Fox, & P. Villedieu. A quadrature-based moment method for dilute fluid-particle flows. *J. Comput. Phys.*, 227(4):2514–2539, February 2008a.
- O. Desjardins, V. Moureau, & H. Pitsch. An accurate conservative level set/ghost fluid method for simulating turbulent atomization. *J. Comput. Phys.*, 227:8395–8416, 2008b.
- B. Desprès & F. Dubois. *Systèmes hyperboliques de lois de conservation*. Les éditions de l'École Polytechnique, Palaiseau, France, Juillet 2005.
- N. Dombrowski & W. R. Johns. The Aerodynamic Instability and disintegration of liquid sheets. *Chem. Eng. Sci.*, 18:203–214, 1963.
- O. A. Druzhinin & S. Elghobashi. Direct numerical simulations of bubble-laden turbulent flows using the two-fluid formulation. *Phys. Fluids*, 10(3):685–697, 1998.
- Jean-Baptiste Dupont & Dominique Legendre. Numerical simulation of static and sliding drop with contact angle hysteresis. *J. Comput. Phys.*, In Press(Accepted Manuscript), August 2009.
- T. Edwards & L. Q. Maurice. Surrogate mixtures to represent complex aviation and rocket fuels. *J. Prop. Power*, 17(2):461–466, Marh-April 2001.
- S. Elghobashi & T. W. Abou-Arab. A two-equation turbulence model for two-phase flows. *Phys. Fluids*, 26(4):931–937, 1983.
- S. Elghobashi, T. W. Abou-Arab, M. Rizk, & A. Mostafa. Prediction of the particle-laden jet with a two-equation turbulence model. *Int. J. Multiphase Flow*, 10(6):697–710, 1984.
- S. Elghobashi & G. C. Truesdell. Direct simulation of particle dispersion in a decaying isotropic turbulence. *J. Fluid Mech.*, 242:655–700, 1992.
- P. Fede, O. Simonin, & P. Villedieu. Monte carlo simulation of colliding particles in gas-solid turbulent flows from a joint fluid-particles pdf equation. In *5th Symp. on Numerical Methods for Multiphase Flows*. ASME-FED, 2002.
- J. Ferry & E. Balachandar. A fast eulerian method for disperse two-phase flow. *Int. J. Multiphase Flow*, 27:1199–1226, 2001.
- J. Ferry & E. Balachandar. Equilibrium expansion for the eulerian velocity of small particles. *Powder Technology*, 125:131–139, 2002.
- J. Ferry, E. Balachandar, & S. Rani. A locally implicit improvement of the equilibrium eulerian method. *Int. J. Multiphase Flow*, 29:869–891, 2003.
- P. Février. *Etude numérique des effets de concentration préférentielle et de corrélation spatiale entre vitesses de particules solides en turbulence homogène isotrope stationnaire*. Phd thesis, INP Toulouse, 2000.
- P. Février & O. Simonin. Statistical and continuum modelling of turbulent reactive particulate flows. part 2: Application of a two-phase second-moment transport model for prediction of turbulent gas-particle flows. In *Theoretical and Experimental Modeling of Particulate Flows, Lecture Series 2000-06, von Karman Institute for Fluid Dynamics, Rhode Saint Genese (Belgium)*, 2000.

- P. Février, O. Simonin, & K. Squires. Partitioning of particle velocities in gas-solid turbulent flows into a continuous field and a spatially uncorrelated random distribution: Theoretical formalism and numerical study. *J. Fluid Mech.*, 533:1–46, 2005.
- R.O. Fox, F. Laurent, & M. Massot. Numerical simulation of spray coalescence in an eulerian framework: Direct quadrature method of moments and multi-fluid method. *J. Comput. Phys.*, 227:058–3088, March 2008.
- B. Franzelli. *Chemical kinetics in Large Eddy Simulation of turbulent combustion*. PhD thesis, Université de Toulouse - Ecole doctorale MEGeP, CERFACS - CFD Team, Toulouse, 2010.
- B. Franzelli, E. Riber, M. Sanjosé, & T. Poinso. A two-step chemical scheme for large eddy simulation of kerosene-air flames. *submitted to Combust. Flame*, 2009.
- R. P. Fraser, N. Dombrowski, & J. H. Routley. The Atomisation of a liquid sheet by an impinging air stream. *Chem. Eng. Sci.*, 18:339–353, 1963.
- N. Frössling. Über die verdunstung fallenden tropfen, (evaporation of falling drops). *Gerlands Beitage zur Geophysik*, 52:170–216, 1938.
- M. García. *Développement et validation du formalisme Euler-Lagrange dans un solveur parallèle et non-structuré pour la simulation aux grandes échelles*. PhD thesis, Université de Toulouse - Ecole doctorale : Mécanique, Energétique, Génie civil, Procédés, 2009.
- N. García-Rosa. *Phénomènes d’allumage d’un foyer de turbomachine en conditions de haute altitude*. PhD thesis, Université de Toulouse - Ecole doctorale : Mécanique, Energétique, Génie civil, Procédés, Toulouse, France, July 2008.
- F. Gevrin, O. Masbernat, & O. Simonin. Granular pressure and particle velocity fluctuations prediction in liquid fluidized beds. *Chem. Eng. Sci.*, 63(9):2450–2464, May 2008.
- H. Ghassemi, Baek S. W., & Q. S. Khan. Experimental study on evaporation of kerosene droplets at elevated pressures and temperatures. *Combust. Sci. Tech.*, 178:1669–1684, 2006.
- L. Gicquel. Manuel utilisateur d’avbp. Webpage, October 2008. URL http://www.cerfacs.fr/~avbp/AVBP_V6.X/HANDBOOK/handbook.php.
- E. Giffen & A. Muraszew. *Atomization of liquid fuels*. Chapman & Hall, London, 1953.
- David G. Goodwin. Cantera code site, July 2009. URL <http://code.google.com/p/cantera/>.
- A. D. Gosman & E. Ioannides. Aspects of computer simulation of liquid fueled combustor. In *AIAA J. Energy*, volume 7(6), pages 482–490, 1981.
- I. S. Gradshteyn & I. M. Ryzhik. *Table of Integrals, Series and Products*. Academic Press Inc., 2nd edition edition, June 1980.
- K. Grau. Applications of the proper orthogonal decomposition method. Internship report WN/CFD/07/97, CERFACS, September 2007. URL http://www.cerfacs.fr/~cfdbib/repository/WN_CFD_07_97.pdf.

- J. B. Greenberg & N. Sarig. An analysis of multiple flames in counterflow spray combustion. *Combust. Flame*, 104:431–459, 1996.
- J. B. Greenberg, I. Silverman, & Y. Tambour. On the origin of spray sectional conservation equations. *Combust. Flame*, 93:90–96, 1993.
- C. Habchi. Projet SIGLE modélisation de l'évaporation de jets liquides en LES décrits par une approche Lagrangienne dans AVBP. Livrable tâche 1.2 L0525001, IFP, 2009a.
- C. Habchi. Tabulation de l'enthalpie liquide en fonction de la température. Communication privée, Mars 2009b.
- C. Habchi, D. Verhoeven, C. Huynh Huu, L. Lambert, J. L. Vanhemelryck, & T. Baritaud. Modeling atomization and break up in high-pressure diesel sprays. *J. Energy*, 106 (970881), February 1997.
- F. Ham, S. V. Apte, G. Iaccarino, X. Wu, M. Herrmann, G. Constantinescu, K. Mahesh, & P. Moin. Unstructured LES of reacting multiphase flows in realistic gas turbine combustors. In *Annual Research Briefs*, pages 139–160. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2003.
- K. Harstad & J. Bellan. Evaluation of commonly used assumptions for isolated and cluster heptane drops in nitrogen at all pressures. *Combust. Flame*, 127:1861–1879, 2001.
- K. Harstad & J. Bellan. Modeling evaporation of Jet-A, JP-7 and RP-1 drops at 1 to 15 bars. *Combust. Flame*, 77:163–177, 2004.
- C. Hirsch. *Numerical Computation of Internal and External Flows*, volume 2. John Wiley & Sons, New York, 1990.
- J. O. Hirschfelder, F. Curtiss, & R. B. Bird. *Molecular theory of gases and liquids*. John Wiley & Sons, New York, 2nd edition edition, 1964.
- K. Hishida, K. Kaneko, & M. Maeda. Turbulence structure of gas-solid two-phase circular jet. *Trans. JSME*, 467(2330-2337), 1985.
- K. Hishida, K. Takemoto, & M. Maeda. Turbulent characteristics of gas-solids two-phase confined jet. *Japanese Journal of Multiphase Flow*, 1(1):56–69, 1987.
- G. L. Hubbard, V. E. Denny, & A. F. Mills. Droplet evaporation: effects of transient and variable properties. *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 18:1003–1008, 1975.
- R. T. Imaoka & W. A. Sirignano. A generalized analysis for liquid-fuel vaporization and burning. *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 48:4342–4353, 2005a.
- R. T. Imaoka & W. A. Sirignano. Transient vaporization and burning in dense droplet arrays. *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 48:4354–4366, 2005b.
- R. Jackson. Locally averaged equations for motion for a mixture of identical spherical particles and a newtonian fluid. *Chem. Eng. Sci.*, 52(15):2457–2469, 1997.
- F. Jaegle. *LES of two-phase flow in aero-engines*. PhD thesis, Université de Toulouse - Ecole doctorale MEGeP, CERFACS - CFD Team, Toulouse, December 2009.

BIBLIOGRAPHIE

- A. Jameson, W. Schmidt, & E. Turkel. Numerical solution of the euler equations by finite volume methods using runge-kutta time stepping schemes. In AIAA paper 81-1259, editor, *14th Fluid and Plasma Dynamic Conference*, Palo Alto, 1981.
- W. P. Jones & D.-H. Sheen. A probability density function method for modelling liquid fuel sprays. *Flow, Turb. and Combustion*, 63:379–394, 1999.
- W. P. Jones & J. H. Whitelaw. Calculation methods for reacting turbulent flows : a review. *Combust. Flame*, 48:1–26, 1982.
- A. Kaufmann. *Vers la simulation des grandes échelles en formulation Euler/Euler des écoulements réactifs diphasiques*. Phd thesis, INP Toulouse, 2004.
- A. Kaufmann, M. Moreau, O. Simonin, & J. Hélie. Comparison between lagrangian and mesoscopic eulerian modelling approaches for inertial particles suspended in decaying isotropic turbulence. *J. Comput. Phys.*, 227(13):6448–6472, 2008.
- R. J. Kee, G. Dixon-Lewis, J. Warnatz, Coltrin M. E., & J. A. Miller. A fortran computer code package for the evaluation of gas phase, multicomponent transport properties. Technical Report SAND86-8246, Sandia National Laboratories, December 1986.
- A. N. Kolmogorov. The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large reynolds numbers. *C.R. Acad. Sci. USSR*, 30:301, 1941.
- M. Kraushaar. *Etude des schémas numériques pour la simulation aux grandes échelles diphasique*. PhD thesis, Université de Toulouse - Ecole doctorale MEGeP, CERFACS - CFD Team, Toulouse, 2011.
- K. K. Kuo. *Principles of Combustion*. Wiley-Interscience, New York, 2nd edition, 2005.
- N. Lamarque. *Schémas numériques et conditions limites pour la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique dans les foyers d’hélicoptère*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, France - Dynamique des Fluides, 2007. URL http://www.cerfacs.fr/~cfdbib/repository/TH_CFD_07_117.pdf.
- C. Laurent. *Développement et validation de modèles d’évaporation multi-composant*. PhD thesis, Institut Supérieur de l’Aéronautique et de l’Espace - Ecole doctorale MEGeP, EDyF, ONERA-DMAE, Toulouse, June 2008.
- F. Laurent & M. Massot. Multi-fluid modelling of laminar polydisperse sprayflames : origin, assumptions and comparison of sectional and sampling methods. *Combust. Theory and Modelling*, 5:537–572, 2001.
- F. Laurent, M. Massot, & P. Villedieu. Eulerian multi-fluid modeling for the numerical simulation of coalescence in polydisperse dense liquid sprays. *J. Comput. Phys.*, 194(2):505–543, 2004.
- R. Lecourt. TIMECOP-AE WP2 : D2.2.1a - Ignition and extinction results at ambient conditions. STREP AST5-CT-2006-030828, ONERA, Fauga, France, November 2008a.
- R. Lecourt. TIMECOP-AE WP2 : D2.2.1c - Injection system two-phase flow characterisation (LDA-PDA). STREP AST5-CT-2006-030828, ONERA, Fauga, France, November 2008b.

- R. Lecourt. Unsteady air flow features of the timecop set-up in mercato test bench. Technical report, ONERA, Fauga, France, 2008c.
- C. H. Lee & R. D. Reitz. Modelling the effect of gas density on the drop trajectory and breakup size of high speed liquid drops. *Atomization and Sprays*, 9:497–517, 1999.
- A. H. Lefebvre. *Atomization and Sprays*. Combustion (Hemisphere Publishing Corporation). Taylor & Francis, 1989.
- Dominique Legendre, Vincent Sarrot, & Pascal Guiraud. On the particle inertia-free collision with a partially contaminated spherical bubble. *Int. J. Multiphase Flow*, 35(2):163–170, February 2009.
- M. Lesieur. *Turbulence in fluids*, volume 40 of *Fluid Mechanics and its applications*. Kluwer Academic Publishers, 3rd rev. edition, 1997.
- G. Linassier & R. Lecourt. Mesures de pertes de charges sur le banc d’essai Mercato. Communication privée, Août 2009.
- O. Lucca-Negro & T. O’Doherty. Vortex breakdown : a review. *Prog. Energy Comb. Sci.*, 27:431–481, 2001.
- J. Luche. *Elaboration of reduced kinetic models of combustion. Application to a kerosene mechanism*. PhD thesis, LCSR Orleans, 2003.
- D. G. MacManus & J. A. Eaton. Flow physics of discrete boundary layer suction - measurements and predictions. *J. Fluid Mech.*, 417:47–75, 2000.
- K. Mahesh, G. Constantinescu, & P. Moin. A numerical method for large-eddy simulation in complex geometries. *J. Comput. Phys.*, 197(1):215–240, 2004. ISSN 0021-9991.
- A. Mansour & N. Chigier. Dynamic behavior of liquid sheets. *Phys. Fluids A*, 3(12):2971–2980, December 1991.
- L. Martinez. *Simulation aux Grandes Échelles de l’Injection de carburant liquide dans les moteurs à combustion interne*. PhD thesis, Université de Toulouse - Ecole doctorale MEGeP, Institut Français du Pétrole, Paris, September 2009.
- L. Martinez, A. Benkenida, & B. Cuenot. A model for the injection boundary conditions in the context of 3d simulation of diesel spray : Methodology and validation. *Fuel*, 89(1):219–228, January 2010.
- F. Mashayek. Numerical investigation of reacting droplets in homogeneous shear turbulence. *J. Fluid Mech.*, 405:1–36, 2000.
- F. Mashayek, F. A. Jaber, R. S. Miller, & P. Givi. Dispersion and polydispersity of droplets in stationary isotropic turbulence. *Int. J. Multiphase Flow*, 23(2):337–355, 1997.
- F. Mashayek & R. Pandya. Analytical description of particle/droplet-laden turbulent flows. *Prog. Energy Comb. Sci.*, 29:329–378, 2003.

- E. Masi, B. Bédard, M. Moreau, & O. Simonin. Euler-euler large-eddy simulation approach for non isothermal particle-laden turbulent jet. In *8th Int. Sym. on Numerical Methods for Multiphase Flow*, number 55143 in ASME-FEDSM, Jacksonville, Florida, USA, August 2008.
- W. Meier, X.R. Duan, & P. Weigand. Investigations of swirl flames in a gas turbine model combustor : I. flow field, structures, temperature, and species distributions. *Combust. Flame*, 144(1-2) :225–236, January 2006.
- T. Menard, S. Tanguy, & A. Berlemont. Coupling level set/vof/ghost fluid methods : Validation and application to 3d simulation of the primary break-up of a liquid jet. *Int. J. Multiphase Flow*, 33 :510–524, 2007.
- R. S. Miller, K. Harstad, & J. Bellan. Evaluation of equilibrium and non-equilibrium evaporation models for many-droplet gas-liquid flow simulations. *Int. J. Multiphase Flow*, 24(6) :1025–1055, 1998.
- P. Moin. Large eddy simulation of multi-phase turbulent flows in realistic combustors. *Prog. Comput. Fluid Dynamics*, 4 :237–240, 2004.
- M. Moreau. *Modélisation numérique directe et des grandes échelles des écoulements turbulents gaz-particules dans le formalisme eulérien mésoscopique*. Phd thesis, INP Toulouse, 2006.
- M. Moreau, O. Simonin, & B. Bédard. Development of gas-particle euler-euler les approach : A priori analysis of particle sub-grid models in homogeneous isotropic turbulence. *Flow, Turb. and Combustion*, available online, 2009.
- J.-B. Mossa. *Extension polydisperse pour la description Euler-Euler des écoulements diphasiques réactifs - TH/CFD/05/74*. Phd thesis, INP Toulouse, 2005.
- F. Nicoud & F. Ducros. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient. *Flow, Turb. and Combustion*, 62(3) :183–200, 1999.
- H. Nomura, Y. Ujiie, H. J. Rath, J. Sato, & M. Kono. Experimental study on high-pressure droplet evaporation using microgravity conditions. In *Proc. Combust. Inst.*, volume 26, pages 1267–1273. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1996.
- W. L. Oberkampf, M. M. Sindir, & A. T. Conlisk. *Guide for the Verification and Validation of Computational Fluid Dynamics*. Guide G-077-98. Am. Inst. Aeronaut. Astronaut., 1997.
- N. Okong'o & J. Bellan. A priori subgrid analysis of temporal mixing layers with evaporating droplets. *Phys. Fluids*, 12(6) :1573–1591, 2000.
- R. Pandya & F. Mashayek. Two-fluid large-eddy simulation approach for particle-laden turbulent flows. *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 45 :4753–4759, 2002.
- N. Patel & S. Menon. Simulation of spray–turbulence–flame interactions in a lean direct injection combustor. *Combust. Flame*, 153(1-2) :228–257, 2008.
- C. Péra. *Simulation et modélisation de la dispersion turbulente, l'évaporation et la combustion d'écoulements diphasiques*. Phd thesis, INSA de Rouen, 2005.

- T. Poinso, C. Angelberger, F. Egolfopoulos, & D. Veynante. Large eddy simulations of combustion instabilities. In *1st Int. Symp. On Turbulence and Shear Flow Phenomena*, pages 1–6, Santa Barbara, Sept 12–15., 1999.
- T. Poinso & S. Lele. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *J. Comput. Phys.*, 101(1):104–129, 1992.
- T. Poinso & D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. R.T. Edwards, 2001.
- T. Poinso & D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. R.T. Edwards, 2nd edition., 2005.
- S. B. Pope. *Turbulent flows*. Cambridge University Press, 2000.
- M. Porta. *Développement, vérification et validation des outils LES pour l'étude du bruit de combustion et de l'interaction combustion/acoustique/turbulence - TH/CFD/07/46*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, France - Dynamique des Fluides, CERFACS - CFD Team, Toulouse, 2007. URL http://www.cerfacs.fr/~cfdbib/repository/TH_CFD_07_46.pdf.
- J. Pozorski & J. P. Minier. On the lagrangian turbulent dispersion models based on the langevin equation. *Int. J. Multiphase Flow*, 24(6):913–945, 1998.
- B. Prosperi, G. Delay, R. Bazile, J. Helie, & H. Nuglish. FPIV Study of gas entrainment by a hollow cone spray submitted to variable density. *Exp. Fluids*, 43(2):315–327, 2007.
- R. H. Rangel & W. A. Sirignano. An evaluation of point-source approximation in spray calculations. *Num. Heat Transfer*, 16(A):37–57, 1989.
- J. Réveillon & F.-X. Demoulin. Effects of the preferential segregation of droplets on evaporation and turbulent mixing. *J. Fluid Mech.*, 583:273–302, 2007.
- J. Réveillon, C. Pera, M. Massot, & R. Knikker. Eulerian analysis of the dispersion of evaporating polydispersed sprays in a statistically stationary turbulent flow. *J. Turb.*, 5(1):1–27, 2004.
- J. Réveillon & L. Vervisch. Analysis of weakly turbulent diluted-spray flames and spray combustion regimes. *J. Fluid Mech.*, 537:317–347, 2005.
- E. Riber. *Développement de la méthode de simulation aux grandes échelles pour les écoulements diphasiques turbulents*. Phd thesis, INP Toulouse, 2007.
- E. Riber, V. Moureau, M. García., T. Poinso, & O. Simonin. Evaluation of numerical strategies for LES of two-phase reacting flows. *J. Comput. Phys.*, 228(2):539–564, 2009.
- M. A. Rizk & S. E. Elghobashi. A two-equation turbulence model for dispersed dilute confined two-phase flows. *Int. J. Multiphase Flow*, 15(1):119–133, 1989.
- N. K. Rizk & A. H. Lefebvre. Influence of liquid film thickness on airblast atomization. *J. Eng. Gas Turb. and Power*, 102:706–710, 1980.
- N. K. Rizk & A. H. Lefebvre. Influence of atomizer design features on mean drop size. *Am. Inst. Aeronaut. Astronaut. J.*, 21(8):1139–1142, August 1983.

BIBLIOGRAPHIE

- N. K. Rizk & A. H. Lefebvre. Internal Flow Characteristics of simplex swirl atomizers. *J. Prop. Power*, 1(3):193–199, May-June 1985.
- P. Roache. Need for control of numerical accuracy. *J. Spacecrafts and Rockets*, 27(2):98–102, 1990.
- P. Roache. Verification of codes and calculations. *Am. Inst. Aeronaut. Astronaut. J.*, 36(5):696–702, 1998.
- A. Roux. *Simulation aux grandes échelles d'un statoréacteur*. PhD thesis, Université de Toulouse - Ecole doctorale MEGeP, CERFACS - CFD Team, Toulouse, July 2009.
- S. Roux, G. Lartigue, T. Poinso, U. Meier, & C. Bérat. Studies of mean and unsteady flow in a swirled combustor using experiments, acoustic analysis and large eddy simulations. *Combust. Flame*, 141:40–54, 2005.
- P. Sagaut. *Introduction à la simulation des grandes échelles*. Springer, mathématiques & applications edition, 1998a.
- P. Sagaut. *Large Eddy Simulation for Incompressible Flows*. Springer, Berlin, 1998b.
- M. Sakiz & O. Simonin. Continuum modelling and lagrangian simulation of the turbulent transport of particle kinetic stresses in a vertical gas-solid channel flow. In *Third Int. Conf. Multiphase Flow*, Lyon, France, 1998.
- M. Sanjosé, T. Lederlin, L. Gicquel, B. Cuenot, H. Pitsch, N. García-Rosa, R. Lecourt, & T. Poinso. Les of two-phase reacting flows. In CTR, editor, *Proceedings of the Summer Program 2008*, pages 251–263, 2008.
- V. Sankaran & S. Menon. Les of spray combustion in swirling flows. *J. Turb.*, 3:011, 2002.
- C. Saulnier, O. Simonin, & D. Vedrine. Eulerian multiphase modeling of feed injection and vaporisation in fcc riser reactors. In *8th International Conference on Circulating Fluidized Bed*, pages 328–335, CFB8, China, 2005.
- S. S. Sazhin. Advanced models of fuel droplet heating and evaporation. *Prog. Energy Comb. Sci.*, 32:162–214, 2006.
- S. S. Sazhin, W. A. Abdelghaffar, P. A. Krutitskii, E. M. Sazhina, & M. R. Heikal. New approaches to numerical modelling of droplet transient heating and evaporation. *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 48:4215–4228, 2005.
- S. S. Sazhin, T. Kristyadi, W. A. Abdelghaffar, & M. R. Heikal. Models for fuel droplet heating and evaporation: Comparative analysis. *Fuel*, 85:1613–1630, 2006.
- S. S. Sazhin, I. N. Shishkova, A. P. Kryukov, V. Y. Levashov, & M. R. Heikal. Evaporation of droplets into a background gas: Kinetic modelling. *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 50:2675–2691, 2007.
- L. Schiller & A. Nauman. A drag coefficient correlation. *VDI Zeitung*, 77:318–320, 1935.

- T. Schmitt. *Simulation des grandes échelles de la combustion turbulente en régime supercritique*. PhD thesis, Université de Toulouse - Ecole doctorale MEGeP, CERFACS - CFD Team, Toulouse, June 2009.
- T. Schönfeld & T. Poinso. Influence of boundary conditions in LES of premixed combustion instabilities. In *Annual Research Briefs*, pages 73–84. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 1999.
- L. Selle, G. Lartigue, T. Poinso, R. Koch, K.-U. Schildmacher, W. Krebs, B. Prade, P. Kaufmann, & D. Veynante. Compressible large-eddy simulation of turbulent combustion in complex geometry on unstructured meshes. *Combust. Flame*, 137(4):489–505, 2004.
- J.-M. Senoner. *Développement de méthodes numériques pour la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique*. PhD thesis, Université de Toulouse - Ecole doctorale MEGeP, CERFACS - CFD Team, Toulouse, May 2010.
- J. M. Senoner, M. Sanjosé, B. Cuenot, & T. Poinso. A methodology to model fuel injection by pressure-swirl atomizer for large eddy simulation of real combustion chamber. *To be submitted to Am. Inst. Aeronaut. Astronaut. J.*, 2009a.
- J. M. Senoner, M. Sanjosé, T. Lederlin, F. Jaegle, M. García, E. Riber, B. Cuenot, L. Gicquel, H. Pitsch, & T. Poinso. Eulerian and lagrangian large-eddy simulations of an evaporating two-phase flow. *C. R. Acad. Sci.*, 337(6-7):458–468, June-July 2009b.
- O. Simonin. Combustion and turbulence in two phase flows. Lecture Series 1996-02, Von Karman Institute for Fluid Dynamics, 1996.
- O. Simonin, P. Fevrier, & J. Lavieville. On the spatial distribution of heavy particle velocities in turbulent flow: from continuous field to particulate chaos. *J. Turb.*, 3, 2002.
- W. A. Sirignano. *Fluid dynamics and transport of droplets and sprays*. Cambridge University Press, New York, USA, 1999.
- M. Sommerfeld & H. H. Qiu. Detailed measurements in a swirling particulate two-phase flow by a phase-doppler anemometer. *Int. J. Heat Fluid Flow*, 12(1), 1991.
- M. Sommerfeld & H. H. Qiu. Characterisation of particle-laden, confined swirling flows by phase-doppler anemometry and numerical calculation. *Int. J. Multiphase Flow*, 19(6):1093–1127, 1993.
- K. D. Squires & J. K. Eaton. Particle response and turbulence modification in isotropic turbulence. *Phys. FluidsA*, 2(7):1191–1203, 1990.
- K. D. Squires & J. K. Eaton. Preferential concentration of particles by turbulence. *Phys. Fluids*, 3(5):1169–1178, 1991.
- K. D. Squires & J. K. Eaton. Effect of selective modification of turbulence on two-equation models for particle-laden turbulent flows. *Transactions of the ASME*, 116:778–784, 1994.
- G. Staffelbach. Performances en calcul parallèle du solveur AVBP. Webpage, October 2009. URL http://www.cerfacs.fr/~avbp/AVBP_V6.X/BENCHMARK/parallel.php.

BIBLIOGRAPHIE

- G. Staffelbach, L.Y.M. Gicquel, G. Boudier, & T. Poinso. Large eddy simulation of self-excited azimuthal modes in annular combustors. *Proc. Combust. Inst.*, 32:2909–2916, 2009.
- D. R. Stull & H. Prophet. Janaf thermochemical tables, 2nd edition. Technical Report NSRDS-NBS 37, US National Bureau of Standards, 1971.
- N. Syred. A review of oscillation mechanisms and the role of the precessing vortex core in swirl combustion systems. *Prog. Energy Comb. Sci.*, 32(2):93–161, 2006.
- C. K. M. Tam & J. C. Webb. Dispersion-relation-preserving finite difference schemes for computational acoustics. *J. Comput. Phys.*, 107:262–281, 1993.
- G.I. Taylor. The mechanics of swirl atomizer. In *7th Int. Cong. Appl. Mech.*, volume 2, pages 280–285, 1948.
- M. W. Vance, K. D. Squires, & O. Simonin. Properties of the particle velocity field in gas-solid turbulent channel flow. *Phys. Fluids*, 18(063302), 2006.
- O. Vermorel, B. Bédard, O. Simonin, & T. Poinso. Numerical study and modelling of turbulence modulation in a particle laden slab flow. *J. Turb.*, 4, 025, 2003.
- A. Vié. *Prise en compte des mécanismes d’atomisation secondaire dans la simulation aux grandes échelles des jets de carburant dans les moteurs à combustion interne*. PhD thesis, Université de Toulouse - Ecole doctorale MEGeP, Institut Français du Pétrole, Paris, 2010.
- A. Vié, L. Martinez, S. Jay, A. Benkenida, & B. Cuenot. Validation of the eulerian mesoscopic approach in particle-charged homogeneous isotropic decaying turbulence in the scope of large eddy simulation of fuel spray. In *ICLASS Proceedings*, number 090, Colorado, USA, July 2009.
- T. Vu. Rapport de stage de master : Simulation aux grandes échelles d’un brûleur industriel diphasique. Technical Report WN/CFD/09/76, CERFACS, Juillet 2009.
- Q. Wang & K. D. Squires. Large eddy simulation of particle-laden turbulent channel flow. *Phys. Fluids*, 8(5):1207–1223, 1996.
- P. Weigand, W. Meier, X.R. Duan, W. Stricker, & M. Aigner. Investigations of swirl flames in a gas turbine model combustor: I. flow field, structures, temperature, and species distributions. *Combust. Flame*, 144(1-2):205–224, January 2006.
- G. F. Yao, S. I. Abdel-Khalil, & S. M. Ghiaasiaan. An investigation of simple evaporation models used in spray simulations. In *ASME J. Heat Trans.*, volume 82, pages 125–179, 2003.
- M. C. Yuen & L. W. Chen. On drag evaporating liquid droplets. *Combust. Sci. Tech.*, 14:147–154, 1976.
- Shinichi Yuu, Takashi Ueno, & Toshihiko Umekage. Numerical simulation of the high reynolds number slit nozzle gas-particle jet using subgrid-scale coupling large eddy simulation. *Chem. Eng. Sci.*, 56(14):4293–4307, July 2001.

- D. Z. Zhang & A. Prosperetti. Averaged equations for inviscid disperse two-phase flow. *J. Fluid Mech.*, 267(1-4):185–219, 1994.
- G. S. Zhu, R. D. Reitz, & S. K. Aggarwal. Gas-phase unsteadiness and its influence on droplet vaporization in sub- and super-critical environments. *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 44:3081–3093, 2001.
- M. Zolver, D. Klahr, & A. Torres. An unstructured parallel solver for engine intake and combustion stroke simulation. *SAE*, (2002-01-1120), 2002.

BIBLIOGRAPHIE

Annexes

Annexe A

Dynamique de la phase gazeuse résolue avec les schémas LW et TTGC

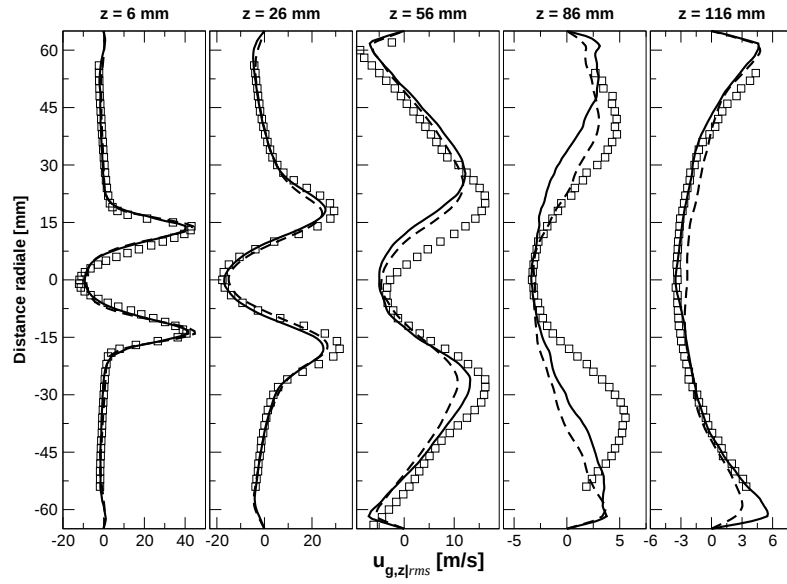


FIG. A.1: **Cas II** - Profils de vitesse moyenne axiale en m/s. Symboles : LDA ; lignes : simulations AVBP - pointillée : LW_PSI_RUE_1, pleine : TTGC_CMS_RUE_1.

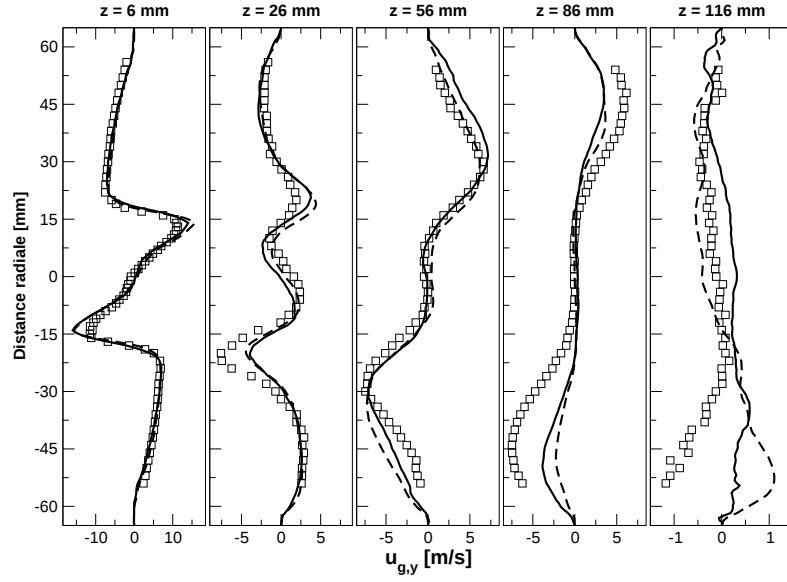


FIG. A.2: **Cas II** - Profils de vitesse moyenne radiale en m/s. Symboles : LDA ; lignes : simulations AVBP - pointillée : LW_PSI_RUE_1, pleine : TTGC_CMS_RUE_1.

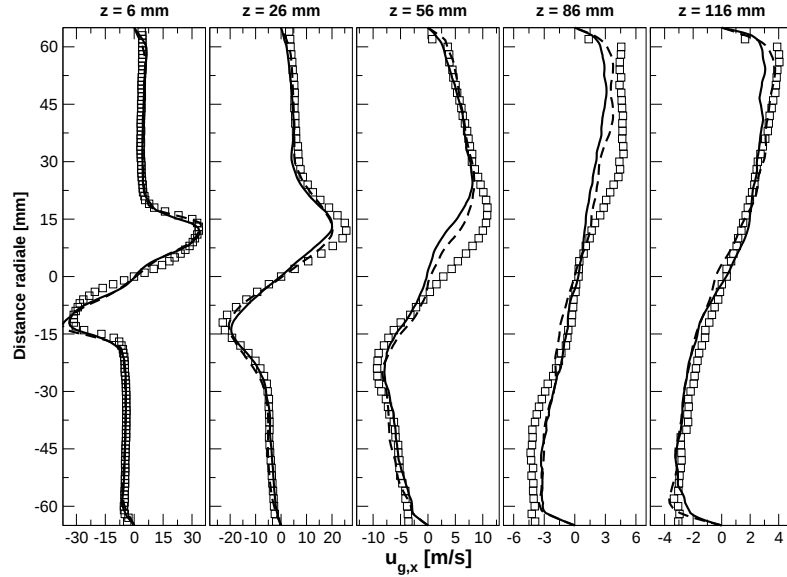


FIG. A.3: **Cas II** - Profils de vitesse moyenne ortho-radiale en m/s. Symboles : LDA ; lignes : simulations AVBP - pointillée : LW_PSI_RUE_1, pleine : TTGC_CMS_RUE_1.

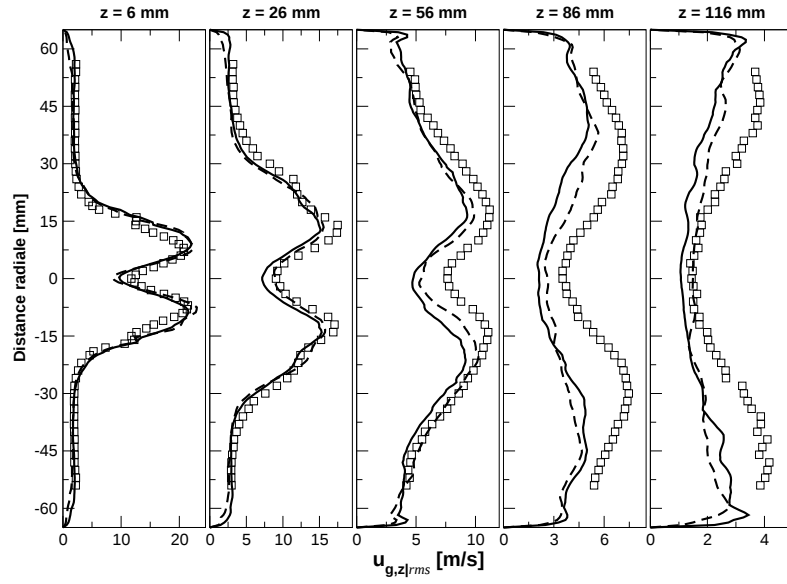


FIG. A.4: **Cas II** - Profils d'écart-type de vitesse axiale en m/s. Symboles : LDA ; lignes : simulations AVBP - pointillée : LW_PSL_RUE_1, pleine : TTGC_CMS_RUE_1.

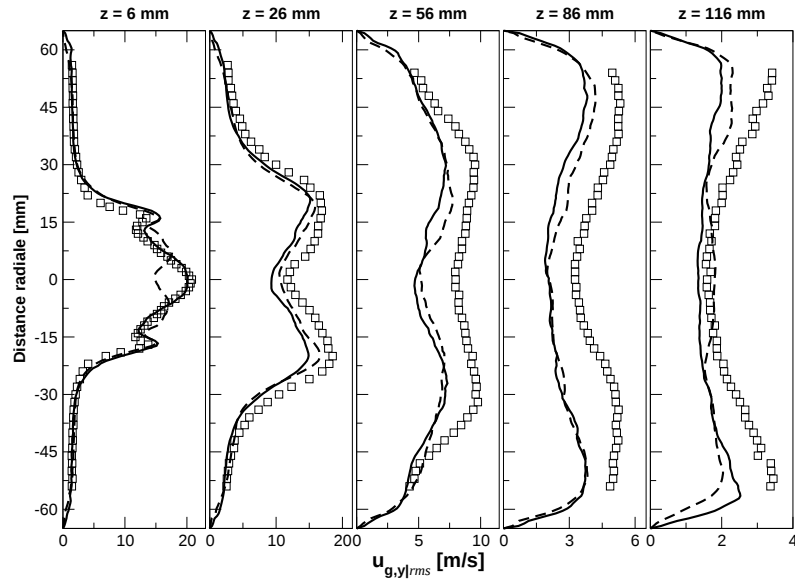


FIG. A.5: **Cas II** - Profils d'écart-type de vitesse radiale en m/s. Symboles : LDA ; lignes : simulations AVBP - pointillée : LW_PSL_RUE_1, pleine : TTGC_CMS_RUE_1.

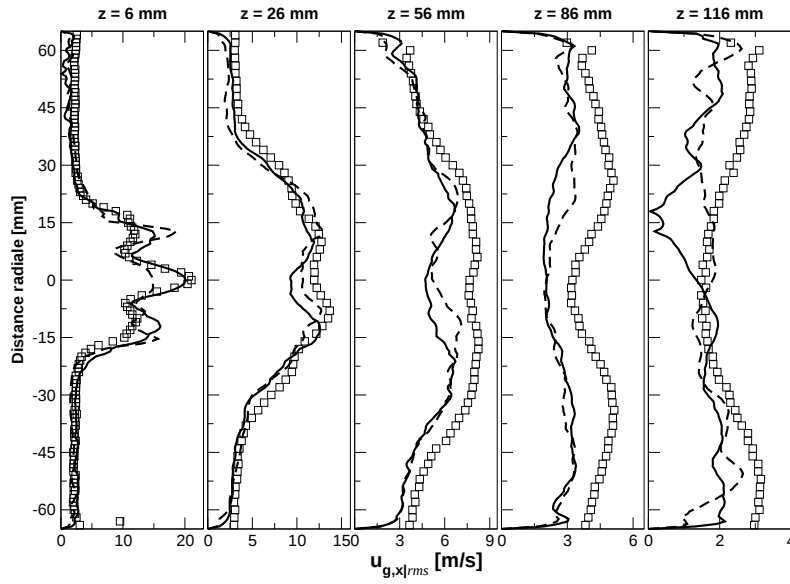


FIG. A.6: **Cas II** - Profils d'écart-type de vitesse ortho-radiale en m/s. Symboles : LDA ; lignes : simulations AVBP - pointillée : LW_PSI_RUE_1, pleine : TTGC_CMS_RUE_1.

Annexe B

Comparaison des fluctuations RMS de vitesse et de diamètre pour les deux débits

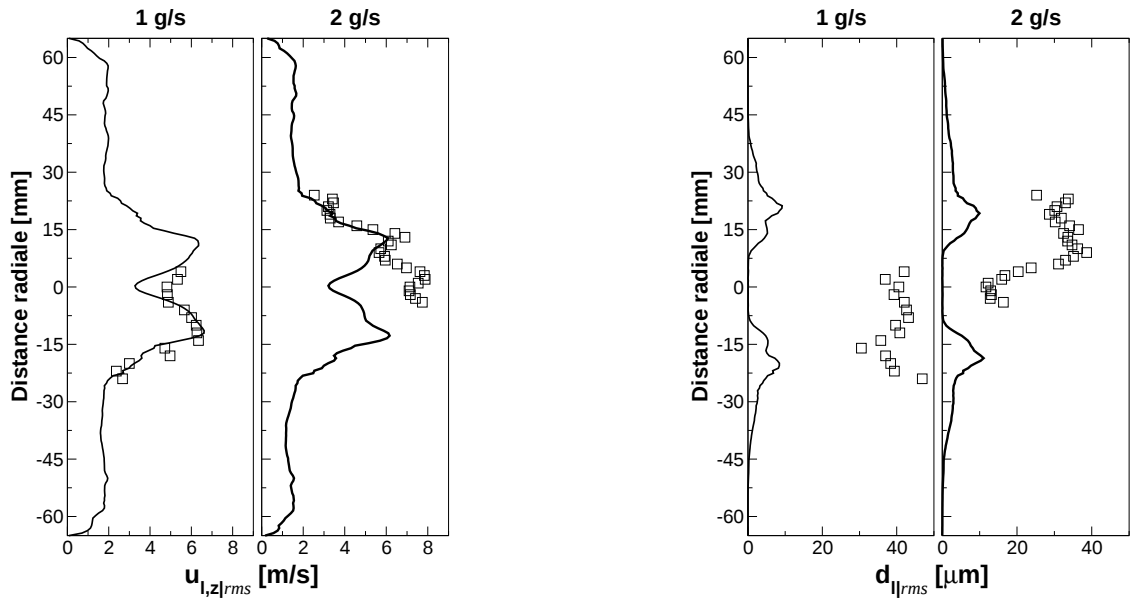


FIG. B.1: Profils à $z = 6$ mm de vitesse moyenne axiale en m/s (gauche) et de diamètre moyen en μm (droite) pour les deux débits calculés. Symboles : mesure LDA (gauche) et PDA (droite), lignes : simulations TTGC-CMS-RUE-1 (1 g/s) et TTGC-CMS-RUE-2 (2 g/s).

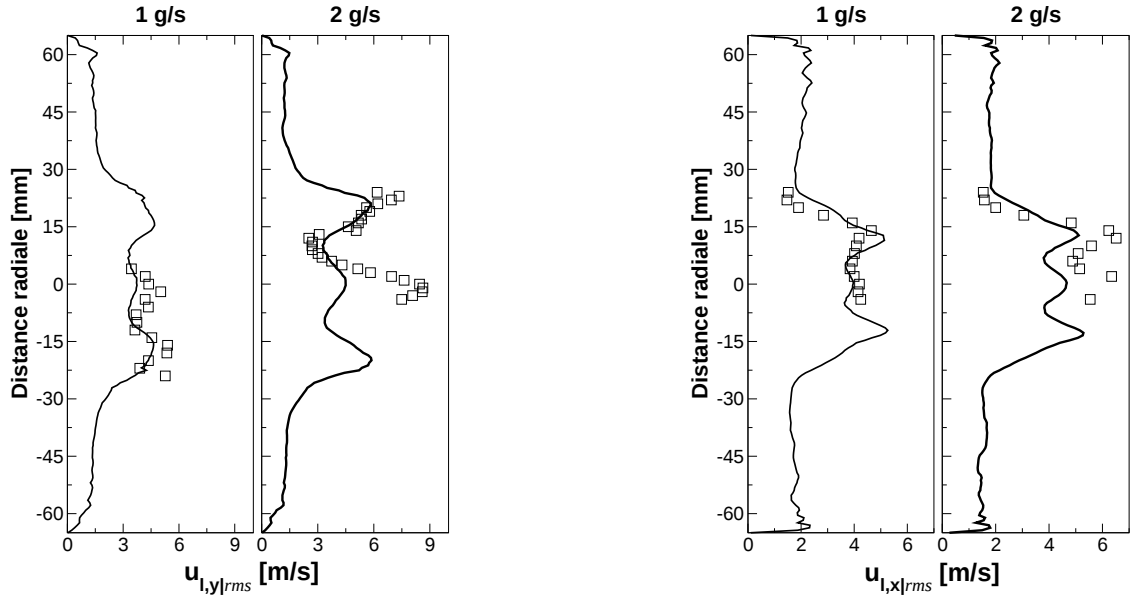


FIG. B.2: Profils à $z = 6$ mm de vitesse moyenne radiale (gauche) et ortho-radiale (droite) en m/s pour les deux débits calculés. Symboles : mesure LDA, lignes : simulations TTGC-CMS_RUE_1 (gauche) et TTGC-CMS_RUE_2 (droite)..

Annexe C

Article publié dans les Comptes Rendus de l'Académie des Sciences

L'article suivant dans sa version de soumission est proposé en annexe de ce manuscrit :

J. M. Senoner, M. Sanjosé, T. Lederlin, F. Jaegle, M. García, E. Riber, B. Cuenot, L. Gicquel, H. Pitsch, & T. Poinso. *Eulerian and lagrangian large-eddy simulations of an evaporating two-phase flow*. C. R. Acad. Sci., 337(6-7) :458-468, June-July 2009b.

Eulerian and Lagrangian Large-Eddy Simulations of an evaporating two-phase flow

J.M. Senoner^a, M. Sanjosé^a, T. Lederlin,^b F. Jaegle^a, M. García^a, E. Riber^a,
B. Cuenot^a, L. Gicquel^a, H. Pitsch^b, T. Poinso^c

^a*Cerfacs, 42 avenue Gaspard Coriolis, 31057 Toulouse Cedex 01, France*

^b*Center for Turbulence Research, 488 Escondido Mall, Stanford CA 94305-3035, USA*

^c*Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse, Allée du Professeur Camille Soula, 31400 Toulouse, France*

Abstract

Large-Eddy Simulations (LES) of an evaporating two-phase flow in an experimental burner are performed using two different solvers, CDP from CTR-Stanford and AVBP from CERFACS, on the same grid and for the same operating conditions. Results are evaluated by comparison with experimental data. The CDP code uses a Lagrangian particle tracking method (EL) while the code AVBP can be coupled either with a mesoscopic Eulerian approach (EE) or with a Lagrangian method (EL). After a validation of the purely gaseous flow in the burner, liquid-phase dynamics, droplet dispersion and fuel evaporation are qualitatively and quantitatively evaluated for three two-phase flow simulations. They are respectively referred as: CDP-EL, AVBP-EE and AVBP-EL. The results of the three simulations show reasonable agreement with experiments for the two-phase flow case.

Résumé

Simulations eulériennes et lagrangiennes aux grandes échelles d'un écoulement diphasique évaporant

Les simulations aux grandes échelles (SGE) de l'écoulement diphasique évaporant dans un brûleur expérimental sont réalisées avec deux codes numériques différents, CDP du CTR-Stanford et AVBP du CERFACS, sur le même maillage et pour les mêmes points de fonctionnement. Les résultats obtenus sont validés par comparaison avec des données expérimentales. Le code CDP peut être couplé à une méthode de suivi Lagrangien de la phase liquide (EL). Le code AVBP peut soit être couplé à une méthode mésoscopique Eulérienne (EE), soit à une méthode de suivi Lagrangien (EL). Après validation de l'écoulement purement gazeux dans le brûleur, la dynamique de la phase liquide, la dispersion et l'évaporation du carburant sont évaluées qualitativement et quantitativement pour trois simulations diphasiques dénotées respectivement : CDP-EL, AVBP-EE et AVBP-EL. Les résultats obtenus par les trois simulations sont en accord raisonnable avec l'expérience pour l'écoulement diphasique.

Key words: Two-phase flows; Eulerian; Lagrangian; Large-Eddy Simulation

Mots-clés : Écoulements diphasiques; Eulérien; Lagrangien; Simulation aux grandes échelles

Email address: senoner@cerfacs.fr (J.M. Senoner).

1. Introduction

Large-eddy simulation (LES) is becoming a standard tool for combustion system analysis since it has extensively demonstrated its ability to predict mean and unsteady reactive gaseous flows in complex geometries [1, 2]. Therefore, LES seems a natural candidate for the investigation of the complex physical phenomena involved in reacting two-phase flows, for which two numerical strategies can be applied:

- In Euler-Lagrange (EL) simulations, the gas is modeled by a classical Eulerian approach whereas particles are tracked in a Lagrangian framework [3, 4].
- Euler-Euler (EE) simulations use the Eulerian description for the gaseous and the dispersed phases [5, 6].

The Euler-Lagrange approach is commonly used as individual droplet physical mechanisms can be easily implemented: polydispersion of a spray, crossing trajectories, bouncing on walls, group and wake combustion of droplets. However, the large number of tracked particles in real applications and their localisation in the vicinity of the injector lead to load balancing issues since the droplets are only present on few processors. Thus, the Euler-Euler approach is sometimes preferred as the parallelisation of the liquid phase solver is identical to the gas solver. However, modelling aspects are generally more difficult to treat in the Euler-Euler framework.

A joint effort between CERFACS, CTR, ONERA and TURBOMECA led to the experimental and numerical investigation of the flow features in a swirl-stabilised lab burner, called MERCATO, fueled with liquid Jet-A kerosene and operated at conditions where two-phase effects are significant.

In the present work the influence of time advancement and dispersed phase treatment are evaluated for a nonreacting evaporating flow as a first step to the simulation of reacting systems. Three LES's of the experiment are compared using both approaches: two simulations are based on the explicit fully compressible solver AVBP (respectively referred as AVBP-EL and AVBP-EE) in which both approaches are implemented, a third uses the implicit incompressible solver CDP from CTR-Stanford combined with a Lagrangian particle tracking technique (CDP-EL). Simulations are performed on the same grid for two regimes: (I) purely gaseous flow (II) gaseous flow with evaporating droplets. Available experimental data for regimes I and II include mean and root-mean square (RMS) velocity fields for the gas and for the droplets.

The paper is organised as follows: the first section describes the MERCATO configuration and its operating conditions. The second section is devoted to the numerical methods. Finally, results are discussed for the two cases presented above in the third section.

2. Configuration

The experimental rig MERCATO (Fig. 1) is a swirled combustor fed with air and Jet A liquid fuel. The plenum and combustion chamber have square sections of respectively 100 mm and 130 mm. They respectively measure 200 mm and 285 mm. The regimes considered are presented in Table 1. Case I is a purely gaseous flow. For case II, the air is heated up to 463 K to enhance evaporation and reduce the formation of liquid fuel films on visualisation windows.

For Case I, LDA measurements were performed on the gas seeded with fine oil droplets ($< 2\mu\text{m}$). The mean and root-mean-square (RMS) gas velocity fields were obtained in five axial planes ($z = 6\text{ mm}$, $z = 26\text{ mm}$, $z = 56\text{ mm}$, $z = 86\text{ mm}$, $z = 116\text{ mm}$), z being the axial distance from the fuel injection plane. For Case II, PDA measurements were performed to obtain the mean and RMS velocity fields of the droplets in three axial planes ($z = 6\text{ mm}$, $z = 26\text{ mm}$, $z = 56\text{ mm}$).

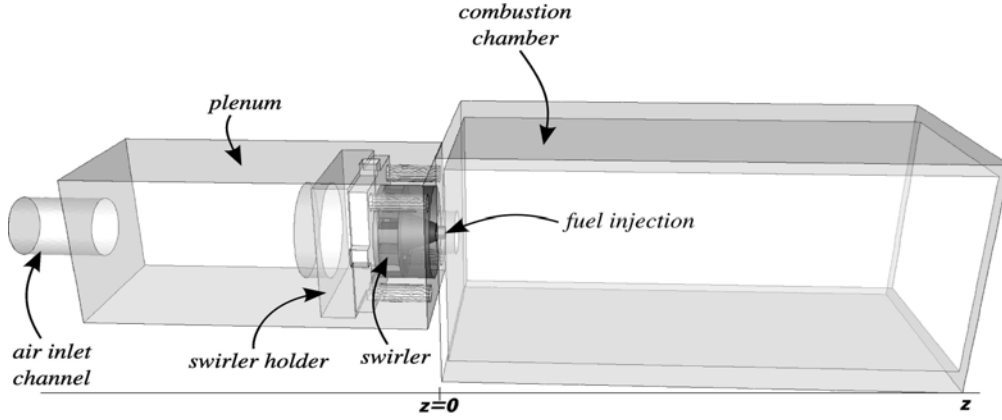


Figure 1. The MERCATO configuration (ONERA Toulouse)

Case	Pressure (atm)	Temperature (K)		Flow rate (g/s)		Equivalence ratio
		Liquid	Air	Air	Fuel	
I: gaseous flow	1	—	300	15	—	—
II: gaseous flow + droplets	1	300	463	15	1	1.0

Table 1

Summary of operating points for the gaseous flow (case I) and the two-phase flow (case II)

3. Numerics

3.1. Gas phase

3.1.1. CDP gas solver

The LES code CDP implicitly solves the filtered incompressible Navier-Stokes equations. Time integration in CDP is based on the fractional-step method [7] and space integration relies on a second-order centered scheme which conserves the kinetic energy while being free of numerical dissipation [8]. The dynamic Smagorinsky model [9] is used for closure of the subgrid stress tensor.

3.1.2. AVBP gas solver

The LES code AVBP explicitly solves the filtered compressible Navier-Stokes equations with a centered finite-element scheme which achieves third order accuracy in both time and space [10]. The WALE model is used for closure of the subgrid stress tensor [11]. Boundary conditions treatment relies on the NSCBC formalism [12].

3.2. Equations for the dispersed liquid-phase

For both approaches, it is assumed that (1) the density of the droplets is much larger than that of the carrier fluid, (2) the droplets are dispersed and collisions between them are negligible, (3) the droplets are much smaller than the LES filter width, (4) droplet deformation effects are small (5) motion due to shear is negligible and (6) gravitational effects are not significant compared to drag.

The governing equations of motion for the dispersed liquid-phase of both Euler-Lagrange and Euler-Euler

formalisms are presented in the two next subsections. The evaporation models and the treatment of source terms are described in common subsections.

3.2.1. Euler-Lagrange approach

The Lagrangian equations governing the droplet motion write:

$$\frac{dx_{p,i}}{dt} = u_{p,i} \quad (1)$$

and:

$$\frac{du_{p,i}}{dt} = \frac{1}{\tau_p} (\tilde{u}_{g@p,i} - u_{p,i}) \quad (2)$$

where $x_{p,i}$, ρ_p and ρ_g respectively denote the position of the droplet centroid, the liquid and gas-phase densities. $u_{p,i}$ is the droplet velocity and $\tilde{u}_{g@p,i}$ the resolved gas-phase velocity interpolated at the droplet location. The droplet relaxation timescale τ_p writes:

$$\tau_p = \frac{4}{3} \frac{\rho_p}{\rho_g} \frac{d_p}{C_D(Re_p) |\tilde{u}_{g@p,i} - u_{p,i}|} \quad (3)$$

where $C_D(Re_p)$ is the local drag coefficient depending on the droplet Reynolds number Re_p [13].

The direct effect of subgrid-scale fluctuations on particle motion is neglected for both Lagrangian approaches. This seems acceptable for swirling separated flows with subgrid scale energy contents much smaller than those of the resolved scales [14].

When dealing with evaporating droplets, equations for the droplet mass and temperature must be solved:

$$\frac{dm_p}{dt} = -\frac{m_p}{\tau_m} \quad (4)$$

and

$$\frac{dT_p}{dt} = \frac{-1}{m_p C_{p,l}} \left(\Phi_g^c + \frac{m_p}{\tau_m} L_v(T_\zeta) \right) \quad (5)$$

where L_v is the latent heat of vaporisation, m_p the mass of the droplet, T_p its temperature, T_ζ the temperature at the droplet surface and $C_{p,l}$ the specific heat of the liquid. Assuming a spherical shape, the diameter of the droplet is obtained from its mass: $d_p = (6m_p/\pi\rho_l)^{1/3}$. Here, τ_m is the droplet lifetime scale, and Φ_g^c the conductive heat flux on the gaseous side at the droplet surface. The terms on the right-hand side of Eqs. 4 and 5 are described in subsection 3.2.3.

In both CDP-EL and AVBP-EL, the interpolation of gaseous properties to the droplet is based on a least-squares operator. For time advancement, CDP-EL uses a third order Runge-Kutta time stepping method while AVBP-EL relies on a first order method. The respective accuracies are consistent with the timesteps of the gaseous solvers, respectively the convective CFL for CDP (implicit scheme) and the acoustic CFL for AVBP (explicit scheme).

3.2.2. Euler-Euler approach

The Eulerian approach assumes that the dispersed phase can be described by a finite number of continuous properties which correspond to a conditional ensemble average of the droplet properties for a given gas-phase realisation. They are called the mesoscopic liquid properties. The monodisperse equation system used in this study is a simplification of the model by Février et al. [5]. There is no account for the

random uncorrelated motion [15]. The resulting model leads to equations for the droplet number density, the liquid volume fraction, the mesoscopic velocity and the mesoscopic enthalpy. By analogy to the gas phase Favre filtering, a LES filter is applied to the mesoscopic equations $\overline{\check{\alpha}_l \hat{f}_l} = \overline{\alpha}_l \hat{f}_l$ where $\overline{\alpha}_l$ is the spatially filtered liquid volume fraction. The final set of equations for the dispersed phase is summarised below. The drag-force is written $F_{d,i}$, with τ_p defined by eq. 3. The evaporation rate is denoted Γ . The liquid phase convective and conductive heat mass transfers Φ_g^c and Φ_g^{ev} are gathered in Π . Details on the source terms are provided in subsection 3.2.4.

$$\frac{\partial \overline{n}_l}{\partial t} + \frac{\partial \overline{n}_l \hat{u}_{l,j}}{\partial x_j} = 0 \quad (6)$$

$$\frac{\partial \rho_l \overline{\alpha}_l}{\partial t} + \frac{\partial \rho_l \overline{\alpha}_l \hat{u}_{l,j}}{\partial x_j} = -\Gamma \quad (7)$$

$$\frac{\partial \rho_l \overline{\alpha}_l \hat{u}_{l,i}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_l \overline{\alpha}_l \hat{u}_{l,i} \hat{u}_{l,j}}{\partial x_j} = \rho_l \overline{\alpha}_l F_{d,i} - \hat{u}_{l,i} \Gamma + \frac{\partial \overline{\tau}_{l,ij}^t}{\partial x_j} \quad (8)$$

$$\frac{\partial \rho_l \overline{\alpha}_l \hat{h}_l}{\partial t} + \frac{\partial \rho_l \overline{\alpha}_l \hat{u}_{l,j} \hat{h}_l}{\partial x_j} = -\Pi \quad (9)$$

By analogy to compressible single-phase flows, the particle subgrid stress tensor $\overline{\tau}_{l,ij}^t$ is modeled using a Smagorinsky formulation for the trace-free part together with a Yoshizawa formulation for the trace part [16].

In the Euler-Euler approach, the same scheme as for the gaseous phase is used to solve the set of equations defined above. No interpolation procedure is involved for interphase exchange terms since for both phases quantities are available at the nodes of the mesh.

3.2.3. Evaporation models

The evaporation models of the three approaches assume infinite thermal conductivity of the liquid: the evaporation rate is driven by the thermal and species diffusion from the droplet surface into the gas phase. The surface droplet temperature is then equal to the constant droplet temperature $T_\zeta = T_p$. In the EE approach, the surface droplet temperature corresponds to the resolved mesoscopic temperature $T_\zeta \equiv \hat{T}_l$.

In the AVBP-EL and AVBP-EE solvers, the Nusselt (Nu) and Sherwood (Sh) numbers are modified following the Ranz-Marshall correlations [17] to take into account the effect of non-zero slip velocity between droplet and carrier phase. In the CDP-EL solver, this effect is modeled by the multiplicative correction for heat and mass transfer [18].

The liquid/gas interface is assumed to be in thermodynamic equilibrium, the Clausius-Clapeyron equilibrium vapor pressure relationship is used to compute the fuel mass fraction at the droplet surface.

This leads to the following expressions for the droplet lifetime τ_m and the convective heating time scales:

$$\frac{m_p}{\tau_m} = \pi d_p [\rho_g \mathcal{D}_F]^s \ln(1+B) Sh \quad (10)$$

$$\Phi_g^c = \pi d_p Nu \lambda^s \left(T_\zeta - \tilde{T}_{g@p} \right) \frac{\ln(1+B)}{B} \quad (11)$$

$$\Phi_g^{ev} = \frac{m_p}{\tau_m} h_{s,F}(T_\zeta) \quad (12)$$

The latent heat of vaporisation is defined as the difference between the droplet enthalpy and the enthalpy of the fuel vapor, at the same temperature: $L_v(T_\zeta) = h_{s,F}(T_\zeta) - m_p C_{p,l} T_\zeta$. B stands for the Spalding

number [19]. $\mathcal{D}_F$ and λ are the fuel vapor diffusivity and conductivity respectively. The superscript s stands for values considered constant throughout the gas layer around the droplets. To take into account the variation of composition and temperature of the gas between the droplet surface and the far-field, the gas properties are evaluated using the $1/3^{rd}$ - $2/3^{rd}$ rule [20].

3.2.4. Source terms

In the Euler-Euler approach, the source terms at a given node n correspond to a statistical mean over the realisations, written $\{\cdot\}_l$:

$$\Gamma_n = \bar{n}_l \left\{ -\frac{m_p}{\tau_m} \right\}_l \quad (13)$$

$$\Pi_n = \bar{n}_l \{ \Phi_g^c + \Phi_g^{ev} \}_l \quad (14)$$

In the Euler-Lagrange approach, the source terms of a particle p with coordinates $x_{p,i}$ are distributed among the nodes n of the cell K_e where this particle is located. The conservative weights $w_{p@n}$ are calculated as follows:

$$w_{p@n} = \frac{\prod_{j \neq n} |x_{p,i} - x_{j,i}|}{\sum_{k \in K_e} \prod_{l \neq k} |x_{p,i} - x_{l,i}|} \quad \text{for} \quad n \in K_e \quad (15)$$

with $x_{n,i}$ the coordinates of the nodes, and $|\cdot|$ the norm operator. Summing over all particles M located in one of the cells sharing the node n , one obtains:

$$\Gamma_n = \sum_{p=1}^M w_{p@n} \left(-\frac{m_p}{\tau_m} \right) \quad (16)$$

$$\Pi_n = \sum_{p=1}^M w_{p@n} (\Phi_g^c + \Phi_g^{ev}) \quad (17)$$

3.3. Choice of a surrogate for kerosene

Jet-A is a mixture of a large number of hydrocarbons and additives. In the LES's, kerosene is modeled by a single *meta* species built as an average of the thermodynamic properties of the multi-component surrogates. Two different surrogates are used for the CDP-EL simulation and the AVBP-EL/ AVBP-EE simulations. For both surrogates, the liquid density is 781 kg/m^3 , the heat of vaporisation is around $3 \times 10^5 \text{ J/kg}$, the liquid heat capacity is around $2 \times 10^3 \text{ J/kg/K}$. Table 2 summarises the differences in molar weight and boiling temperature for both surrogates.

3.4. Liquid boundary conditions

In the CDP-EL simulations, particles are elastically bouncing at walls while no treatment is applied in the AVBP-EL simulations. In the AVBP-EE simulation the liquid phase fulfills a slip condition at walls. One of the main factors controlling the dispersion of the droplets is the description of the injection pattern. In this study there is no computation of the atomisation process at the injector outlet and the three approaches have to rely on measurements and empirical correlations to specify the injection condition on the atomiser outlet plane. The liquid injection boundary conditions are based on a methodology which specifies tangential and axial outflow velocity components following the empirical correlations of Rizk and

Solver	Composition	Molar Weight	Boiling Tempe
Surrogate reference	(in volume)	(g/mol)	-rature (K@1 atm)
CDP-EL	80% of n-decane	165	606.5
	20% tri-methyl-benzene		
AVBP-EE and AVBP-EL	74% of n-decane		
[21]	15% propyl-benzene	137.2	445.1
	11% propyl-cyclo-hexane		

Table 2
Summary of used surrogate fuel properties.

Lefebvre [22]. Inlet profiles are reconstructed without parameter adjustment from the following quantities: the liquid flow rate, the spray angle and the orifice diameter. These inlet profiles are used in the CDP-EL simulation. In AVBP-EE the discharge orifice of the atomiser (diameter 0.5 mm) must be sufficiently meshed to control the flow rate through the boundary. A compromise between discretising the boundary patch and keeping a reasonable time step (limited by the smallest cell in the domain) is found in enlarging the boundary condition area which is translated a few millimeters downstream from the real injection position. Boundary profiles are built from the inlet empirical profiles (also used in CDP-EL) and applying the air entrainment model of Cossali [23].

In the AVBP-EL approach, particles are injected from a discrete point corresponding to the real injector position while the same empirical correlations as in the AVBP-EE/ CDP-EL approaches are used to determine particle velocities. Particles are injected with a random angle ranging between zero and the experimentally specified spray angle (40°). The axial velocity is constant while the tangential velocity component is a linear function of the injection angle. No RMS value is specified at injection. For both AVBP-EL and CDP-EL, the initial droplet diameter is sampled from a Lognormal distribution fitted with the spatially averaged experimental probability density function (pdf) of droplet diameters at the first measurement plane ($z = 6$ mm). For the AVBP-EE simulation the first moment of the distribution is used for injection.

4. Results

4.1. Gas flow without droplets (Case I)

Figures 2 and 3 show mean and RMS gas velocity profiles in the axial and transverse direction for five axial positions. The results of two AVBP and CDP gaseous simulations are compared with the experimental data (symbols). The averaging time in both LES codes is of the order of 400 ms, corresponding to approximately 10 flow-through times.

Both solvers capture the flow correctly and results are in very good agreement with experiments. Some discrepancies with experiments may be observed for the mean axial and tangential velocities, Figs. 2 and 3, left, at the two last stations. However, measurement uncertainties are expected to be large in this low speed region as the experimental profiles are not symmetric. Slight differences between the two codes appear especially for RMS of tangential velocity, see Fig. 3, right. Here, the higher order of spatial accuracy of AVBP seems to provide a better representation of the unsteady flowfield. On the other hand, the lower numerical dissipation of CDP can be noticed in the last measurement plane for all velocity profiles as they lie above those of AVBP.

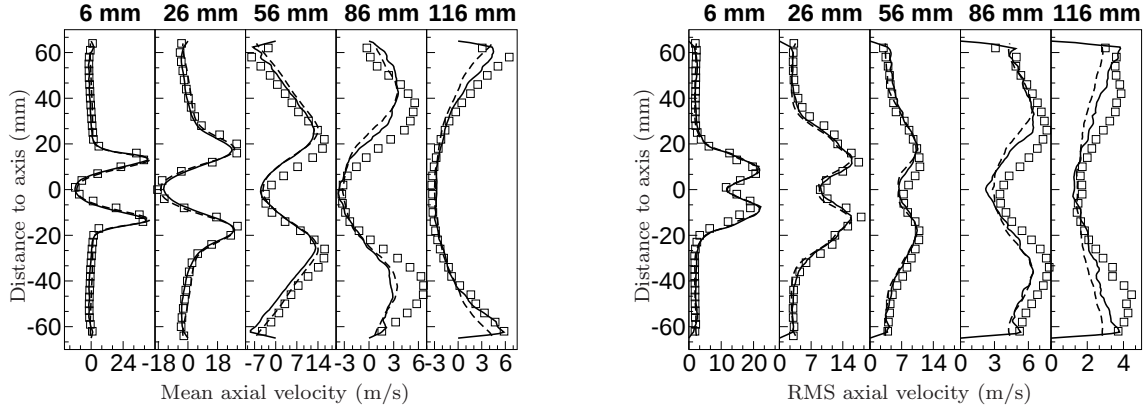


Figure 2. Gaseous axial velocity (Case I). Left: mean, right: RMS. $\square$ LDA, — CDP, - - AVBP.

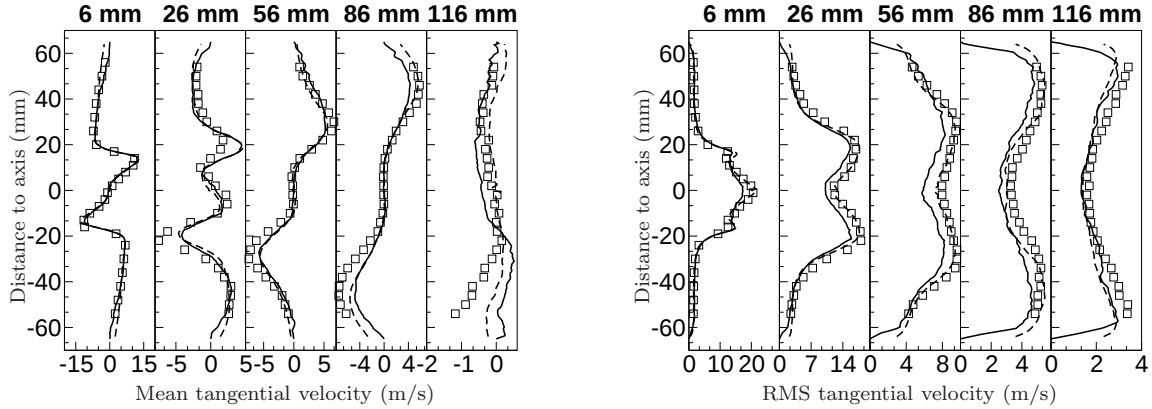


Figure 3. Gaseous tangential velocity (Case I). Left: mean, right: RMS. $\square$ LDA, — CDP, - - AVBP.

4.2. Gas flow with evaporating droplets (Case II)

For case II, droplets are injected starting from a well-established gas-phase solution. Figures 4 and 5a show an instantaneous view of droplet distribution in the combustion chamber. The three simulations capture the main structures of droplet preferential concentration: the central recirculation zone has a low droplet density, dense pockets of droplets can be seen in the shear layer of the swirled-air jet and droplets are trapped in the recirculation zone in corners of the chamber. Such droplet concentrations lead to fuel vapor inhomogeneities through the evaporation source terms, as shown in Figs. 5b and 6. In the CDP-EL simulation, the liquid seems to evaporate more strongly close to the injector exit, as indicated by the evaporation rate isocontours (3 levels of respectively 7, 14 and 21 $kg/m^3/s$). Such high evaporation rates are not observed in the AVBP-EL simulation which injects the same polydisperse spray. Thus, differences seem rather to be caused by the different surrogate or the evaporation model than by the evaporation of small droplets.

The droplet velocity profiles at four axial planes are compared in Figs. 7, 8. The first plane ($z = 0$ mm) is not an experimental measurement plane but is added for comparison of the profiles very close to the injector ($z = -3$ mm). Only averaged velocities (over all droplet size classes) are shown as the EE

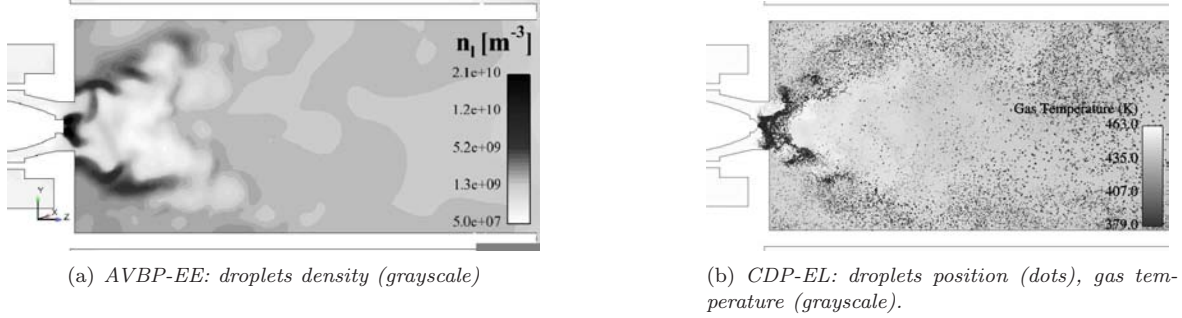


Figure 4. Instantaneous droplet distribution in the Mercato chamber (Case II). Comparison between AVBP-EE and CDP-EL

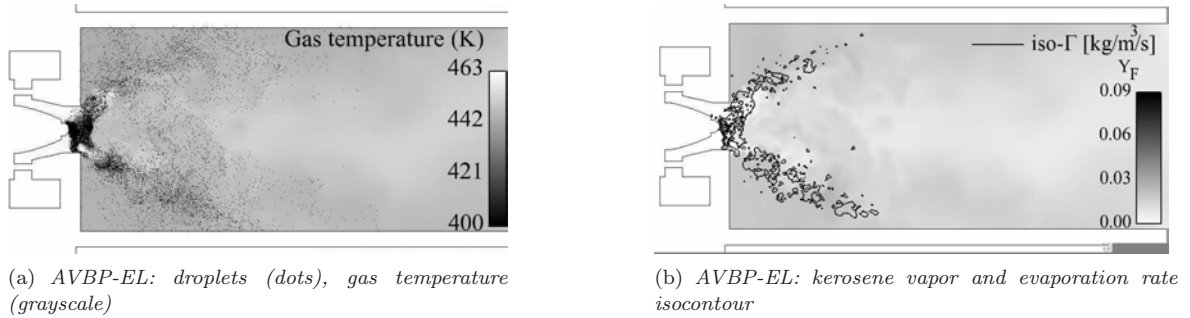


Figure 5. AVBP-EL: Instantaneous droplet distribution in the Mercato chamber and instantaneous kerosene vapor mass fraction with isocontours of evaporation rate (Case II).

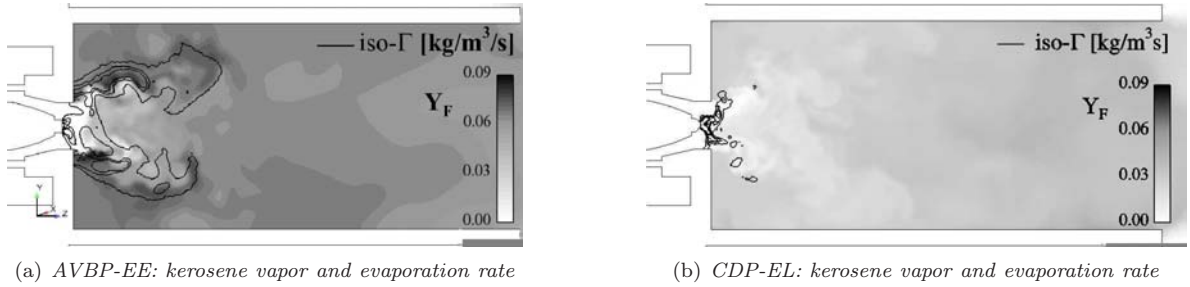


Figure 6. Instantaneous kerosene vapor mass fraction (grayscale) and evaporation rate (isocontours) approach only resolves a monodisperse spray. The averaging time in the three simulations is of the order of 80 ms, corresponding to approximately 2 flow-through times. The CDP-EL statistics are not properly converged in areas where the droplets density is low, such as the chamber centerline. It is surprising to note that the AVBP-EL simulations display far better statistical convergence, maybe a consequence of the much smaller timestep of AVBP compared to CDP. The EE method clearly takes advantage of its continuous mesoscopic approach (transported quantities are averaged over the particle realisations) and results show the most converged profiles.

Note that the air flow rate was increased when performing the droplet LDA measurements at $z = 56$ mm to delay spray impingement on measurement windows. Thus, the comparisons between LES and experiments at this location are affected with larger uncertainties.

The agreement between the three simulations and the experimental profiles is good at $z = 6$ mm for

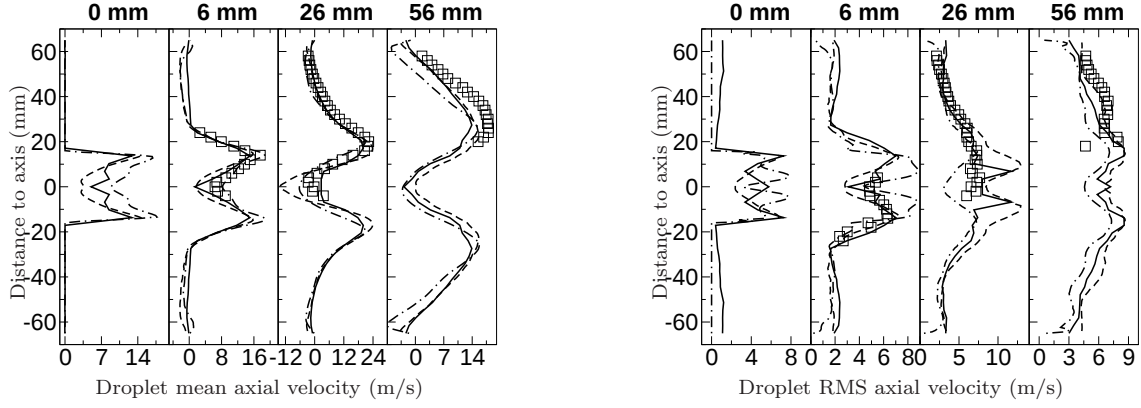


Figure 7. Droplet axial velocity (Case II). Left: mean, right: RMS. $\square$ PDA, — CDP-EL, - - AVBP-EL, - · AVBP-EE.

the droplet axial and tangential velocities, showing that the injection procedures described in section 3.4 are reasonable for such flows, where drag effects on particles are very pronounced. The agreement is still satisfying at $z = 26$ and 56 mm for axial velocity. Differences may be observed for all three simulations close to the axis where the recirculation zone is located. There, spatial segregation effects according to droplet size are expected to be significant. However, the polydisperse Lagrangian simulations do not provide more accurate results in this zone than the monodisperse Eulerian simulation. The three simulations fail to reproduce the shape and the levels of axial RMS velocity at the first location. For the next stations, the three simulations reproduce the right fluctuation levels, but the shapes of the profiles are not well captured, even though the experimental data is quite noisy.

Concerning the mean tangential component shown in Fig. 8, the three simulations predict the right opening of the spray at $z = 6$ mm, but the discrepancies increase as the spray goes downstream. The maximum value and location are not well predicted at $z = 26$ mm and $z = 56$ mm. The polydisperse AVBP-EL and monodisperse AVBP-EE results are very close at $z = 6$ mm and the increasing differences between them $z = 26$ mm and $z = 56$ mm may originate from polydisperse effects. However, results do not significantly improve for AVBP-EL. Looking at the RMS values of the droplets tangential component shown in Fig. 8, the shape and values are well reproduced by the AVBP-EE simulation while the AVBP-EL simulation fails to predict the decrease close to the centerline at $z = 26$ mm. The CDP-EL statistics of this component are not sufficiently converged to compare them with experiments.

4.3. Comparison of computational cost

Table 3 gives a comparison of the computational times for the AVBP-EE and AVBP-EL simulations on different numbers of processors. All parameters are identical for the gaseous phase and initialisation time is negligible in comparison with computational time. The AVBP-EL calculation is performed with 285 000 droplets, no dynamical load balancing is performed.

The AVBP-EL solver is nearly twice as fast as the AVBP-EE solver, demonstrating that the Lagrangian particle tracking method is well suited for low particle numbers. However, AVBP-EE closely follows the ideal speed-up curve whereas AVBP-EL suffers from the absence of dynamical load balancing. Moreover, it must be remembered that the computational cost of AVBP-EE is independent of particle number.

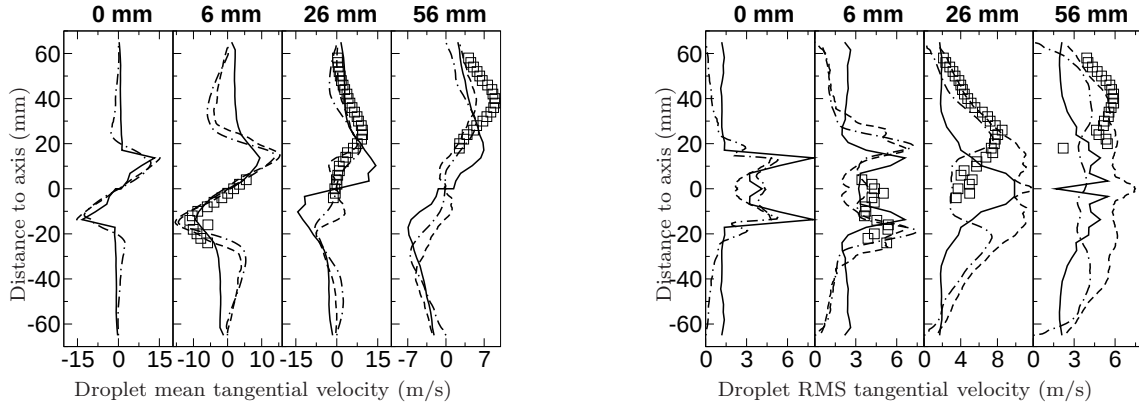


Figure 8. Droplet tangential velocity (Case II). Left: mean, right: RMS. $\square$ PDA, — CDP-EL, - - AVBP-EL, - · AVBP-EE.

Processor numbers	256	1024
AVBP-EE	4.342	1.154
AVBP-EL	2.842	0.874

Table 3

Comparaison of reduced efficiencies on an IBM Blue Gene / L supercomputer. The reduced efficiency is the CPU time per mesh node and per iteration ($\mu\text{s}/\text{iteration}/\text{node}$).

5. Conclusions

The precision of two LES solvers (AVBP / CDP) combined with two different approaches for the modelling of the dispersed phase (Eulerian / Lagrangian) has been compared in the case of a swirled liquid kerosene / air combustor experimentally investigated at ONERA Toulouse. The agreement with experiments for the gaseous phase is very good for both LES solvers. For the dispersed phase, mean axial velocity profiles are correctly reproduced while the opening of the spray is mispredicted further downstream. Moreover, only correct fluctuation levels are obtained for RMS velocity profiles. Finally, a clear gain of accuracy could not be evidenced for the polydisperse Lagrangian simulations compared to the monodisperse Eulerian simulation. This may be a consequence of the simplified injection model and requires further investigation.

Acknowledgements

The supports of Turbomeca, of the Délégation Générale de l'Armement, of the Center of Turbulence Research (Stanford), of the European Community through the TIMECOP-AE project (#AST-CT-2006-030828) and Marie Curie Fellowships (contract MEST-CT-2005-020426) are gratefully acknowledged.

References

- [1] H. El-Asrag and S. Menon. Large eddy simulation of bluff-body stabilized swirling non-premixed flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31:1747–1754, 2007.

-
- [2] C. Duwig and C. Fureby. Large eddy simulation of unsteady lean stratified premixed combustion. *Combustion and Flame*, 151(1-2):85–103, 2007.
 - [3] K. Mahesh, G. Constantinescu, S. Apte, G. Iaccarino, F. Ham, and P. Moin. Large eddy simulation of reacting turbulent flows in complex geometries. In *ASME Journal of the Applied Mechanics*, volume 73, pages 374–381, 2006.
 - [4] N. Patel and S. Menon. Simulation of spray–turbulence–flame interactions in a lean direct injection combustor. *Combustion and Flame*, 153(1-2):228–257, 2008.
 - [5] P. Février, O. Simonin, and K. Squires. Partitioning of particle velocities in gas-solid turbulent flows into a continuous field and a spatially uncorrelated random distribution: Theoretical formalism and numerical study. *Journal of Fluid Mechanics*, 533:1–46, 2005.
 - [6] M. Boileau, S. Pascaud, E. Riber, B. Cuenot, L.Y.M. Gicquel, T. Poinso, and M. Cazalens. Investigation of two-fluid methods for Large Eddy Simulation of spray combustion in Gas Turbines. *Flow, Turbulence and Combustion*, 80(3):291–321, 2008.
 - [7] J. Kim and P. Moin. Application of a fractional-step method to incompressible Navier-Stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 59(2):308–323, 1985.
 - [8] K. Mahesh, G. Constantinescu, and P. Moin. A numerical method for large-eddy simulation in complex geometries. *Journal of Computational Physics*, 197(1):215–240, 2004.
 - [9] M. Germano, U. Piomelli, P. Moin, and W. Cabot. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Physics of Fluids*, 3(7):1760–1765, 1991.
 - [10] O. Colin and M. Rudgyard. Development of high-order Taylor-Galerkin schemes for unsteady calculations. *Journal of Computational Physics*, 162(2):338–371, 2000.
 - [11] F. Nicoud and F. Ducros. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient. *Flow, Turbulence and Combustion*, 62(3):183–200, 1999.
 - [12] V. Moureau, G. Lartigue, Y. Sommerer, C. Angelberger, O. Colin, and T. Poinso. High-order methods for DNS and LES of compressible multi-component reacting flows on fixed and moving grids. *Journal of Computational Physics*, 202(2):710–736, 2005.
 - [13] L. Schiller and A. Nauman. A drag coefficient correlation. *VDI Zeitung*, 77:318–320, 1935.
 - [14] S.V. Apte, K.P. Mahesh, P. Moin, and J.C. Oefelein. Large-eddy simulation of swirling particle-laden flows in a coaxial-jet combustor. *International Journal of Multiphase Flow*, 29:1311–1331, 2003.
 - [15] E. Riber, V. Moureau, M. García, T. Poinso, and O. Simonin. Evaluation of numerical strategies for LES of particulate two-phase recirculating flows. *Journal of Computational Physics*, 228:539–564, 2009.
 - [16] M. Moreau. *Modélisation numérique directe et des grandes échelles des écoulements turbulents gaz-particules dans le formalisme eulérien mésoscopique*. Phd thesis, INP Toulouse, 2006.
 - [17] W. E. Ranz and W. R. Marshall. Evaporation from drops. *Chem. Eng. Prog.*, 48(4):173, 1952.
 - [18] G. M. Faeth. Evaporation and combustion of sprays. *Progress in Energy and Combustion Science*, 9:1–76, 1983.
 - [19] K. K. Kuo. *Principles of Combustion*. John Wiley, New York, 1986.
 - [20] G. L. Hubbard, V. E. Denny, and A. F. Mills. Droplet evaporation: effects of transient and variable properties. *International journal of heat and mass transfer*, 18:1003–1008, 1975.
 - [21] J. Luche. *Elaboration of reduced kinetic models of combustion. Application to a kerosene mechanism*. PhD thesis, LCSR Orleans, 2003.
 - [22] N.K. Rizk and A.H. Lefebvre. Internal flow characteristics of simplex atomizer. *Journal of Propulsion and Power*, 1(3):193–199, may-june 1985.
 - [23] G.E. Cossali. An integral model for gas entrainment into full cone sprays. *Journal of Fluid Mechanics*, 439:353–366, 2001.

Case	Pressure	Temperature (K)		Flow rate (g/s)		Equivalence
	(atm)	Liquid	Air	Air	Fuel	ratio
I: gaseous flow	1	–	300	15	–	–
II: gaseous flow + droplets	1	300	463	15	1	1.0

Table 4

Summary of operating points for the gaseous flow (case I) and the two-phase flow (case II)

Solver	Composition	Molar Weight	Boiling Tempe
Surrogate reference	(in volume)	(g/mol)	-rature (K@1 atm)
CDP-EL	80% of n-decane	165	606.5
	20% tri-methyl-benzene		
AVBP-EE and AVBP-EL	74% of n-decane	137.2	445.1
[21]	15% propyl-benzene		
	11% propyl-cyclo-hexane		

Table 5

Summary of used surrogate fuel properties.

Processor numbers	256	1024
AVBP-EE	4.342	1.154
AVBP-EL	2.842	0.874

Table 6

Comparaison of reduced efficiencies on an IBM Blue Gene / L supercomputer. The reduced efficiency is the CPU time per mesh node and per iteration ($\mu s/iteration/node$).